



Wrocław, 2023-10-20

Recenzja rozprawy doktorskiej
Mono- and diradicals derived from dihydrobenzo[e][1,2,4]triazin-4-yl

mgr. Dominiki Pomikło

Przedłożona mi do oceny rozprawa mgr. Dominiki Pomikło podsumowuje prace badawcze wykonane przez Kandydatkę na Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN pod opieką promotorską prof. dr. hab. Piotra Kaszyńskiego. Rozprawa liczy 229 stron i została przygotowana w języku angielskim. Zgodnie z Art. 187 ust. 3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym, zwanej dalej „ustawą”, Rozprawę doktorską może stanowić praca pisemna, w tym monografia naukowa, zbiór opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych, praca projektowa, konstrukcyjna, technologiczna, wdrożeniowa lub artystyczna, a także samodzielna i wyodrębniona część pracy zbiorowej. Na przedłożoną rozprawę składają się:

1. Informacje wstępne: strony tytułowe, podziękowania, spis projektów, spis treści, streszczenia oraz lista publikacji składających się na rozprawę;
2. Pełne opracowanie materiału, mające charakter monografii o klasycznym układzie rozdziałów (wstęp, cel, wyniki i dyskusja);
3. Wykaz cytowanej literatury;
4. Podsumowanie innych osiągnięć Kandydatki;
5. Kopie trzech z pięciu opublikowanych artykułów oryginalnych składających się na rozprawę (z wyłączeniem pozycji D-4 i D-5, które ukazały się w tym roku).
6. Pisemne deklaracje współautorów określające zakres ich wkładu w powstanie artykułów składających się na rozprawę (Tabela 1).

Od strony redakcyjnej rozprawa Pani mgr Pomikło ma więc jednocześnie charakter monografii i zbioru artykułów. Jestem pełen uznania dla Kandydatki za podjęcie się tego podwójnego trudu, przyznając jednocześnie, że spotykam się z takim rozwiązaniem po raz pierwszy.

Tabela 1. Deklarowane udziały autorskie w artykułach składających się na rozprawę.

Wkład autorski		Artykuły				
Institucja	Autor	D-1 JOC 2019	D-2 OL 2019	D-3 JOC 2023	D-4 MCF 2023	D-5 CEJ 2023
CBMiM	P. Kaszyński	KAR	KAR	KAR	KAR	KAR
	A. Bodzioch	SRE	SRE	SRE		
WCh PŁ	A. Pietrzak	X	X		X	
Osaka U.	R. Kishi				T	
WCh UŁ	M. Celeda	S				

Oznaczenia udziałów: K – opracowanie koncepcji, S – synteza, A – analiza, interpretacja i dyskusja wyników, R – redakcja manuskryptu (tekst/grafika), T – teoria, X – rentgenografia strukturalna, E - elektrochemia.

Rozprawa doktorska Pani mgr Pomikło eksploruje chemię rodników Blattera i – w szerszej perspektywie – pochodnych benzo[e][1,2,4]triazyn. Cele szczegółowe zawarte w poszczególnych artykułach składających się na zbiór są następujące:

- D-1. Rozwinięcie metod syntezy odpowiednich benzotriazyn podstawionych w pozycji 3.
- D-2 i D-3. Otrzymanie odpowiednich rodników Blattera sfunkcjonalizowanych w pozycji 3 i zbadanie ich właściwości.
- D-4 i D-5. Diodniki Blattera o różnych typach złączy między podjednostkami.

Powyższy zbiór celów, spójny i bardzo dobrze zaplanowany, wpisuje się świetnie w realizowany od lat program badawczy prof. Kaszyńskiego, znacząco rozszerzając dotychczasowe osiągnięcia zespołu w obszarze chemii otwartopowłokowych materiałów organicznych. Badania przeprowadzono z ponadprzeciętną starannością, o czym m.in. świadczy jakość danych analitycznych i sposób ich opracowania (w tym zwłaszcza widm EPR i UV-vis oraz eksperymentów elektrochemicznych).

Dysertacja wyróżnia się również swoją stroną redakcyjną: Autorka bardzo dobrze posługuje się naukowym językiem angielskim i radzi sobie doskonale z rysowaniem nie tylko złożonych struktur chemicznych ale i ze składaniem skomplikowanych równań. Usterki redakcyjne są bardzo nieliczne, a dane eksperymentalne są kompletne, właściwie przedstawione i przekonująco zinterpretowane. Moje zastanowienie budzą jedynie niektóre widma absorpcyjne (np. związku **6.8[6,7]** na rysunku 6.6.3.37), na których ucięte są absorpcje długofalowe (powyżej 1100 nm). Czy wiadomo, czym są tworzące się w tych eksperymentach formy o małych przerwach energetycznych?

Po zapoznaniu się z całością rozprawy stwierdzam, że spełnia ona wszystkie wymagania stawiane rozprawom doktorskim w Art. 187 ustawy:

1. **Rozprawa prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Kandydatki w dyscyplinie nauki chemiczne.** Świadczy o tym doskonale opracowanie literatury przedmiotu zawarte we wstępie (160 cytowanych pozycji), które obejmuje nie tylko systematykę stabilnych rodników, ale również teorię związków otwartopowłokowych i omówienie metod analitycznych. Opis ten, przedstawiający m.in. bardzo użyteczne podsumowanie dostępnych metod syntezy rodników typu Blattera, jest klarowny, a jednocześnie bardzo szczegółowy: z powodzeniem mógłby zostać opublikowany w formie artykułu przeglądowego.
2. **Rozprawa wykazuje umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez Kandydatkę.** Artykuły składające się na zbiór są opracowaniami wieloautorskimi, co jest typowe w naukach chemicznych. Udział pozostałych autorów, opisany w ich oświadczeniach, jest uzasadniony względami merytorycznymi i organizacyjnymi. Wkład współautorów obejmuje (a) opiekę promotorską, (b) udział w pracach syntetycznych (c) współpracy zewnętrzne w zakresie rentgenografii strukturalnej oraz obliczeń struktury elektronowej. Jakkolwiek zakres tych udziałów syntetycznych nie jest sprecyzowany, można przyjąć, że Kandydatka miała wiodący wkład w prace preparatywne i opracowanie wyników we wszystkich artykułach oryginalnych, co w czterech spośród pięciu artykułów zapewniło jej pierwsze miejsce na liście autorów. Autorka potrafi efektywnie prowadzić badania we współpracy (również międzynarodowej), co jest nieodzowną umiejętnością we współczesnej nauce.
3. **Rozprawa stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego.** Przedłożony materiał badawczy jest nowatorski, dostatecznie obszerny i opracowany zgodnie ze współczesnymi standardami, w sposób niebudzący merytorycznych wątpliwości. Trzy

artykuły oryginalne składające się na zbiór, zawierają istotne naukowe wyniki w obszarze syntezy, spektroskopii i teorii rodników i oligorodników organicznych. Wszystkie prace zostały zrecenzowane przez niezależnych ekspertów i opublikowane w wiodących czasopismach ogólnych i specjalistycznych, z których wszystkie dbają o odpowiedni rygor procesu *peer review* (*CEJ, JOC, Org. Lett., Mat. Chem. Front.*). Materiały uzupełniające załączone do artykułów oryginalnych (Supporting Information) są wzorowo opracowane i stawiają w bardzo dobrym świetle warsztat eksperymentalny Kandydatki.

Powyższe dane wskazują w mojej ocenie jednoznacznie, że przedłożona rozprawa wypełnia wszystkie ustawowe wymogi i tym samym może stać się podstawą nadania stopnia naukowego doktora w dyscyplinie nauki chemiczne. Dlatego z przekonaniem **rekomenduję Radzie Naukowej Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN dopuszczenie Pani mgr Dominiki Pomikło do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora.**

Zarówno poziom naukowy badań, jak i jakość opracowania wyników oraz ranga ich upowszechnienia są bardzo wysokie. Należy podkreślić, że rozwinięta przez autorkę chemia jest warsztatowo wymagająca, ze względu na złożoność syntez, potencjalną niestabilność produktów i trudności analityczne wynikające z paramagnetyzmu produktów. Prowadzone badania mają fundamentalny charakter, jednak otrzymane połączenia mogą mieć szereg zastosowań, m.in. jako materiały w elektronice i spintronice organicznej, co może stać się istotną wartością dodaną w dalszych badaniach w tym obszarze. Na zbiór artykułów tworzący ocenianą rozprawę składają się artykuły w wiodących czasopismach specjalistycznych i ogólnych, a poziom redakcyjny wszystkich opublikowanych artykułów jest ponadstandardowo wysoki. Mając na uwadze te wszystkie osiągnięcia, zachęcam Radę Naukową CBMiM PAN do rozważenia możliwości wyróżnienia przedmiotowej rozprawy zgodnie z wewnętrznymi kryteriami wyróżnień stosowanymi przez Instytut.

