

Recenzja

osiągnięcia naukowego dr Celiny Sikorskiej nt.:

„Zaprojektowanie i zbadanie metodami chemii kwantowej superatomów do zastosowań jako silne czynniki redoks”

oraz całości jej dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego będących podstawą w postępowaniu dotyczącym nadania jej stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne

Podstawa formalna i prawna recenzji

1) Pismo Pana dr hab. Zbigniewa Kaczyńskiego, profesora Uniwersytetu Gdańskiego, Przewodniczącego Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne z dnia 13 listopada 2023 roku, informujące o podjętej uchwale Rady (Uchwała nr 189/RD/23 Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Gdańskiego z dnia 8 listopada 2023 roku) oraz o powołaniu mnie na recenzenta w przewodzie habilitacyjnym Pani dr Celiny Sikorskiej.

2) Wniosek Pani dr Celiny Sikorskiej z dnia 31 sierpnia 2023 roku, złożony w Radzie Doskonałości Naukowej (RDN) w Warszawie o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego.

Udostępniony mi drogą elektroniczną wniosek wraz z załącznikami, złożony przez Panią dr Celinę Sikorską w RDN w Warszawie, obejmuje następujące dokumenty sporządzone w języku polskim i angielskim: tytuł osiągnięcia naukowego, dane kontaktowe wnioskodawcy, kopię dyplomu potwierdzającego nadanie stopnia doktora nauk chemicznych w zakresie chemii, autoreferat będący opisem cyklu 12 tematycznie powiązanych publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe, a także informujący o współpracy z różnymi zespołami naukowymi w kraju i za granicą, wykaz wszystkich osiągnięć naukowych, informację o aktywności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzującej naukę oraz kopie opublikowanych artykułów wchodzących w skład osiągnięcia naukowego wraz z oświadczeniem współautora dla 4 wspólnych prac. W dokumentacji brakuje tylko kopii formalnych pism, potwierdzających odbycie staży naukowych, krajowych i zagranicznych oraz kopii formalnych pism, potwierdzających uczestnictwo w projektach naukowych, krajowych i zagranicznych. Jest jedynie informacja Habilitantki o takich aktywnościach w autoreferacie i wykazie osiągnięć naukowych. Biorąc pod uwagę te dodatkowe dane Habilitantki można uznać, że jej dokumentacja jest kompletna i może być recenzowana w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego. W swojej recenzji przyjąłem kryteria zdefiniowane w art. 219 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku (Dz. U. z 2023 r. poz. 742 z późn. zm.).

Wykształcenie i przebieg pracy naukowo-zawodowej Pani dr Celiny Sikorskiej

Pani dr Celina Sikorska (Habilitantka) ukończyła z wyróżnieniem pięcioletnie studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego (UG). Pracę magisterską pt. „Aniony superhalogenowe AlX_4^- oraz BX_4^- ($X=F, Cl, Br$)” wykonała pod kierunkiem Pana prof. dr hab. Piotra Skurskiego. Po jej obronie w 2008 roku, otrzymała tytuł zawodowy magistra chemii w specjalności informatyka chemiczna.

Zafascynowana projektami naukowymi realizowanymi w Zakładzie Chemii Kwantowej, kierowanym przez Pana prof. P. Skurskiego, kontynuowała swój rozwój naukowy na 4-letnich Studiach Doktoranckich Chemii i Biochemii na tym samym Wydziale, rozszerzając badania kwantowo-chemiczne dla większej liczby związków zaliczanych do super-halogenów. Promotorem jej pracy doktorskiej pt. „Stabilność wybranych połączeń boru i glinu indukowana elektrono-akceptorowymi właściwościami BX_4 i AlX_4 ($X=F, Cl$)” był Pan prof.

P. Skurski. Pracę tę obroniła z wyróżnieniem w 2012 roku i uzyskała stopień doktora nauk chemicznych. Otrzymała za nią nagrodę Polskiego Towarzystwa Chemicznego (Oddział Gdański) za najlepszą pracę doktorską w dziedzinie nauk chemicznych.

Od zakończenia Studiów Doktoranckich swoją pracę zawodową związała już całkowicie z Uniwersytetem Gdańskim. W ramach 5-cio miesięcznego stażu podoktorskiego, pracowała na stanowisku specjalisty ds. badań naukowych w Instytucie Ochrony Środowiska i Zdrowia Człowieka UG w zespole naukowym Pana prof. dr hab. Tomasza Puzyna. W czasie stażu uczestniczyła, jako wykonawca, w kilku międzynarodowych projektach badawczych. Następnie po rocznym urlopie macierzyńskim powróciła w marcu 2014 roku do pracy zawodowej na Wydziale Chemii UG. Zatrudniona na stanowisku adiunkta naukowego do końca kwietnia 2019 roku, była kierownikiem lub wykonawcą licznych projektów naukowych. Odebrała dwa zagraniczne staże naukowe, jeden krótki (45-cio dniowy) pod koniec 2014 roku w Japonii (*National Institute for Environmental Studies, Research Center for Environmental Risk, Tsukuba*) i drugi dłuższy (4-letni) w latach 2019–2023 w Nowej Zelandii (*University of Auckland*). Ten ostatni długi zagraniczny staż naukowy przerwał na 4 lata jej zatrudnienie na Wydziale Chemii UG.

Po zakończeniu stażu w Nowej Zelandii powróciła na swoją Alma Mater do Pracowni Modelowania Molekularnego w Katedrze Chemii Teoretycznej na stanowisko adiunkta naukowego w marcu 2023 r. W sumie Habilitantka pracuje na Wydziale Chemii UG na etacie adiunkta naukowego 6 lat. Jest autorem lub współautorem 35 artykułów naukowych, w tym 23 po uzyskaniu stopnia doktora (ok. 70%). Z informacji naukometycznych wynika, że sumaryczny impact faktor (IF) opublikowanych prac jest większy niż 120, sumaryczna punktacja ministerialna wg aktualnej listy wynosi 3000, opublikowane artykuły cytowane są ok. 600 razy, a H-indeks wynosi 15. Będąc uczestnikiem, wykonawcą lub kierownikiem projektów badawczych, współpracowała i współpracuje z licznymi zespołami naukowymi krajowymi i zagranicznymi. Za aktywność naukową wielokrotnie była wyróżniana i nagradzana oraz otrzymywała liczne stypendia naukowe, w tym dwa prestiżowe granty MARSDEN Fast-START finansowane przez *New Zealand Royal Society Te Apārangi*.

Ocena osiągnięcia naukowego

Opisane w autoreferacie osiągnięcie naukowe nt.: „Zaprojektowanie i zbadanie metodami chemii kwantowej super-atomów do zastosowań jako silne czynniki redoks” obejmuje cykl 12 tematycznie powiązanych artykułów naukowych (pozycje **H1–H12**) opublikowanych w takich czasopismach, jak *Chemical Physics Letters* (2), *Journal of Physical Chemistry A* (1), *Journal of Chemical Physics* (2), *Physical Chemistry Chemical Physics* (2), *Journal of Chemical Information and Modeling* (1), *RSC Advances* (1), *International Journal of Quantum Chemistry* (1), *Chemphyschem: European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry* (1) i *Journal of Computational Chemistry* (1). Wszystkie czasopisma znajdują się na liście ministerialnej A, suma ich punktów wynosi 1110, a sumaryczny IF 44,707. W 8 pracach (**H1–H8**), opublikowanych w latach 2015–2019, Pani dr Celina Sikorska jest jedynym autorem zaplanowanych, wykonanych i przedyskutowanych badań naukowych, prowadzonych samodzielnie na Wydziale Chemii UG. Natomiast 4 ostatnie prace (**H9–H12**) powstały we współpracy z prof. Nicolą Gaston w czasie jej 4-letniego pobytu (2019–2023) na Uniwersytecie w Auckland w Nowej Zelandii. Habilitantka dołączyła do dokumentacji oświadczenie prof. Nicoli Gaston o jej wkładzie naukowym w badaniach, opublikowanych we wspólnych artykułach. Dotyczy on głównie planowania koncepcji badań naukowych. Ponadto w pracy **H11** prof. Nicola Gaston obok Habilitantki pełni rolę autora korespondencyjnego.

Cykl publikacji **H1–H12** dotyczy szerokiego spectrum badań przeprowadzonych dla połączeń zwanych super-atomami o ekstremalnych (super) właściwościach fizycznych, fizykochemicznych i chemicznych. Habilitantka badała zarówno super-halogeny, czyli połączenia wieloatomowe o silnych właściwościach elektrono-akceptorowych, silniejszych niż halogeny (F, Cl, Br i I), jak i super-alkalia, czyli połączenia wieloatomowe o silnych właściwościach elektrono-donorowych, silniejszych niż metale alkaliczne (Li, Na, K i Cs). Analizowała ich właściwości utleniająco-redukujące oraz możliwości tworzenia jonowych super-soli typu: [super-alkalium⁺][super-halogen⁻].

Z uwagi na to, że właściwości super-atomów można precyzyjnie kontrolować, poprzez dodanie, usunięcie lub zastąpienie pojedynczego atomu, tego typu połączenia mogą być szeroko zastosowane w różnych dziedzinach nauki i życia na świecie. Habilitantka podaje w autoreferacie i publikacjach wiele ciekawych możliwości zastosowań. Na przykład, mogą być wykorzystane w reakcjach utleniania i redukcji, jako silne reduktory lub utleniacze innych związków chemicznych, m.in. do usuwania toksycznych związków ze środowiska poprzez ich utlenianie lub redukcję do związków nietoksycznych. Mogą również służyć, jako katalizatory różnych reakcji chemicznych, w tym także w procesie przekształcania dwutlenku węgla. Mogą też być stosowane, jako elementy budulcowe w chemii materiałowej do otrzymywania tańszych materiałów o określonych właściwościach. Z uwagi na te szerokie możliwości aplikacyjne, obliczenia z wykorzystaniem metod chemii kwantowej typu *ab initio*, obok bardziej praco-, materiałowo-, aparaturowo- i czasochłonnych eksperymentów, są bardzo istotne i należą do podstawowych badań, zwłaszcza dla młodej klasy połączeń. Dostarczają one wiele niezbędnych informacji o ich strukturze elektronowej, izomerii (gdy istnieje), stabilności, a także właściwościach fizycznych, fizykochemicznych i chemicznych.

Tematyka badań naukowych podjętych przez Habilitantkę w osiągnięciu naukowym jest kontynuacją prac badawczych (obliczeń kwantowo-chemicznych) prowadzonych przez nią w czasie wykonywania pracy magisterskiej, a następnie doktorskiej w Pracowni Chemii Kwantowej pod kierunkiem Pana prof. P. Skurskiego. Należy w tym miejscu także wspomnieć o Panu prof. dr hab. Macieju Gutowskim, promotorze pracy doktorskiej prof. P. Skurskiego. Dzięki jego wyjątkowej aktywności naukowej rozwinęła się Pracownia Chemii Kwantowej na Wydziale Chemii UG. Pan prof. M. Gutowski jest absolwentem Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Pracę doktorską wykonał pod kierunkiem Pana prof. dr hab. Lucjana Pieli w pracowni prof. dr Włodzimierza Kołosa (zm. 1996 r.), jednego z twórców współczesnej chemii kwantowej w Polsce i na świecie. Prof. W. Kołos był wcześniej promotorem pracy doktorskiej prof. L. Pieli. Korzenie rozwoju Pracowni Chemii Kwantowej w Gdańsku sięgają zatem aż do pracowni prof. W. Kołosa w Warszawie, jednej z najlepszych pracowni chemii kwantowej w Polsce i na świecie. Pan prof. P. Skurski pracował w tej pracowni pod opieką Pana prof. L. Pieli w czasie swojego stażu, po uzyskaniu tytułu zawodowego magistra na Wydziale Chemii UG. Pan Prof. M. Gutowski współpracując po doktoracie z prof. Jack'iem Simons'em (*Department of Chemistry, University of Utah, Salt Lake City, Utah, USA*), rozwinął na Wydziale Chemii UG nową tematykę badań teoretycznych dla zjonizowanych układów chemicznych, wprowadzając metody obliczeń dla energetycznych parametrów jonizacji. Z kolei Pan prof. P. Skurski, który odbył staż podoktorski u prof. J. Simons'a, badającego m.in. super-halogeny, przeniósł i rozwinął tematykę super-atomów na Wydziale Chemii UG.

Różnorodność super-atomów oraz ich ekstremalnych właściwości i zastosowań jest tak duża, że badania dla tych połączeń kontynuuje w Gdańsku Pan prof. P. Skurski, m.in. we współpracy z prof. J. Simons'em. Prowadzą je także inni pracownicy Katedry Chemii Teoretycznej UG, m.in. Pani prof. dr hab. Iwona Anusiewicz, wcześniejsza doktorantka prof. P. Skurskiego, która również odbyła staż u prof. J. Simons'a i która uzyskała tytuł doktora habilitowanego w 2012 roku na podstawie osiągnięcia naukowego nt. „Superhalogeny i superalkalia jako związki o ekstremalnych właściwościach fizykochemicznych”. Na podstawie przeglądu publikacji zawartych w bazie Web of Science, mogę stwierdzić, że jest to jedyny ośrodek naukowy w Polsce, który od ponad 20 lat prowadzi badania teoretyczne dla super-atomów. Metodyka badań dla super-atomów, rozwinięta w ciągu tych lat w Pracowni Chemii Kwantowej UG, stoi na bardzo wysokim poziomie naukowym. Habilitantka wykształcona w tej Katedrze w czasie wykonywania pracy magisterskiej i doktorskiej, utrzymuje ten wysoki poziom metodyki w swoim cyklu 12 artykułów, stanowiących osiągnięcie naukowe.

Pani dr Celina Sikorska po doktoracie, stażu podoktorskim, rocznym urlopie macierzyńskim i powrocie na Wydział Chemii UG rozpoczęła badania naukowe nad kielkującą w niej pracą habilitacyjną całkowicie samodzielnie. W pierwszej publikacji z 2015 roku (**H1**), której była jedynym autorem, wykorzystwała proste metody analizy korelacyjnej. Polegają one na sformułowaniu odpowiednich teorii, tzn. zależności ujętych wzorem matematycznym w postaci prostej lub wielokrotnej korelacji liniowej, pozornie nie związanych ze sobą serii informacji. Metody analizy korelacyjnej są znane w chemii od 100 lat. Były powszechnie stosowane w ubiegłym stuleciu pod ogólną nazwą „liniowe zależności energii swobodnych” (*Linear Free-Energy Relationships*, LFER), między innymi w fizycznej chemii organicznej i spektroskopii (np. równania

Hammett'a, Taft'a, Yukawa-Tsuno, itp.). Stosuje się je również w biologii molekularnej, chemii leków, chemii ochrony środowiska i toksykologii do ilościowego opisu zależności między biologiczną aktywnością związku chemicznego (biomolekuły, leku, bądź trucizny) a jego strukturą, z którą powiązane są różnorodne właściwości fizyczne, fizykochemiczne i biochemiczne aktywnego związku. Zależności tego typu znane są pod nazwą „ilościowe zależności między strukturą a aktywnością” (*Quantitative Structure-Activity Relationships*, QSAR). Metody analizy korelacyjnej mają dwa cele główne, pierwszy to opisanie w sposób ilościowy zależności między parametrami struktury a parametrami interesujących właściwości (aktywności), a drugi to możliwość przewidywania właściwości fizykochemicznych (aktywności) dla nowych związków, które nie były jeszcze badane, albo dla których określenie parametrów fizykochemicznych i biochemicznych jest trudne lub wręcz niemożliwe.

Metody analizy korelacyjnej są także stosowane w nowych działach chemii, m.in. chemometrii i informatyce chemicznej. W swoim osiągnięciu naukowym (pozycja H1) Habilitantka zastosowała je w chemii teoretycznej do ilościowego opisu parametru energetycznego VDE dla serii anionów super-halogenowych AlX_4^- oraz BX_4^- (X: F, Cl, Br) za pomocą parametrów (z ang. *descriptors*), charakteryzujących strukturę połączeń. Do tego celu wybrała dwa parametry strukturalne, jeden związany z kształtem i ilością heteroatomów w anionie, a drugi powiązany z masami atomowi pierwiastków. Wartości VDE zostały wcześniej obliczone w Pracowni Chemii Kwantowej pod kierunkiem Pana prof. P. Skurskiego i zebrane w pracy opublikowanej w *Inorganic Chemistry* (P20), której Habilitantka jest współautorem, a które były wcześniej celem obliczeń, wykonanych przez nią w ramach pracy magisterskiej. W ten sposób Habilitantka zręcznie włączyła wyniki pracy magisterskiej do swojego osiągnięcia naukowego, będącego przedmiotem w postępowaniu o nadanie jej stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Poszukując nowych struktur super-halogenów o interesujących właściwościach fizykochemicznych z punktu widzenia zastosowań, Pani dr Celina Sikorska przebadła sześć układów, grupując je w serie o analogicznych składach, różniące się bądź rodzajem atomu centralnego, bądź ligandu. Pierwsze dwie nowe serie opublikowane w H2 obejmowały klasyczne aniony super-halogenowe jedno- i dwucentrowe posiadające atomy gazów szlachetnych (Ng: Xe, Rn), powiązanych z najbardziej elektroujemnym spośród halogenów fluorem. Były to połączenia typu: NgF_n^- (n : 3, 5, 7) oraz $Ng_nF_{6n+1}^-$ (n : 2). Z kolei następna seria opisana w H3 zawierała układy anionowe o wzorze ogólnym $M(OF)_{k+1}^-$, posiadające atom metalu w centrum (M: Li, Na, K, Be, Mg, Ca, B, Al) i grupy fluoroksyłowe jako ligandy na zewnątrz (k w tym przypadku oznacza maksymalną formalną wartościowość M). Wyniki badań dla tej serii porównała z wynikami kolejnej analogicznej serii $M(F)_{k+1}^-$ (M: Li, Na, K, Be, Mg, Ca, B, Al), która posiada inny mniejszy ligand, fluor. Ostatnie serie przeanalizowane w H4 i H5 zawierają w centrum atom magnezu i ligandy mieszane typu $Mg_nF_{2n+1-2m}O_m^-$ (n : 2, 3; m : 1, 2, 3) lub niemieszane typu $Mg_nF_{2n+1}^-$.

Analogicznie jak we wcześniejszych pracach prowadzonych w pracowni Pana prof. P. Skurskiego, badania teoretyczne dla nowych serii super-halogenów Habilitantka wykonała dla fazy gazowej, stosując różne metody chemii kwantowej, które poznała w czasie pracy magisterskiej i doktorskiej. Niektóre układy analizowała także w środowisku wodnym, stosując odpowiedni model teoretyczny (*polarizable continuum model*, PCM). Dla połączeń wielocentrowych przeanalizowała dodatkowo izomery konstytucyjne. Badała stabilność geometryczną, termodynamiczną i elektronową zaplanowanych połączeń oraz mechanizmy prawdopodobnych reakcji tworzenia form anionowych lub ich fragmentacji. Dla wszystkich stabilnych struktur anionowych określiła wartości VDE. W niektórych przypadkach dla form neutralnych super-halogenów obliczyła również powinowactwo do elektronu (adiabatyczne i/lub wertykalne). Na podstawie obliczeń kwantowych, wykazała, że obecność atomu metalu, jako atomu centralnego w super-halogenie, nie jest konieczna, aby układ wykazywał ekstremalne właściwości elektrono-akceptorowe. Przykładem są serie anionów, które zawierają atomy gazów szlachetnych (NgF_n^- oraz $Ng_nF_{6n+1}^-$). Porównując serie $M(OF)_{k+1}^-$ z $M(F)_{k+1}^-$ oraz $Mg_nF_{2n+1-2m}O_m^-$ z $Mg_nF_{2n+1}^-$ wykazała w sposób ilościowy, że elektroujemność determinuje nie tylko stabilność termodynamiczną anionów super-halogenowych, ale także wpływa na wartości VDE. Większa elektroujemność F niż OF pociąga za sobą większą wartość VDE dla anionu super-halogenowego.

W kolejnym etapie pracy badawczej Habilitantka przeanalizowała na kilku przykładach właściwości utleniające (jonizujące) neutralnych super-halogenów w fazie gazowej, acetonitrylu i/lub 1,2-dichlorobenzenu (prace **H5–H7**). Wybrała kilka połączeń jednocentrowych MX_{k+1}^* (M: Li, Mg, Al; X: F, Cl) oraz jedno połączenie wielocentrowe $Mg_3F_7^*$. Badała ich oddziaływanie z cząsteczką fulerenu C_{60} , w wyniku którego może się tworzyć układ donorowo-akceptorowy [D][A] z utlenieniem fulerenu. W wyniku utlenienia (zjonizowania C_{60} do kationorodnika: $[C_{60}] - e \rightarrow [C_{60}^{*+}]$), neutralny super-halogen (SH^*) może wiązać elektron z fulerenu ($[SH^*] + e \rightarrow [SH^-]$) i może powstać stabilne połączenie jonowe typu $[C_{60}^{*+}][SH^-]$. Wysoka energia jonizacji C_{60} wymaga silnego neutralnego super-halogenu do jego całkowitego utlenienia. Spośród badanych neutralnych super-halogenów Habilitantka wybrała $Mg_3F_7^*$, który wykazuje bardzo silne (nazwane przez nią „magiczne”) właściwości utleniające i następnie zastosowała go do zbadania utleniania cząsteczek mono- i ditlenków metali MO_n (M: Mg, Co, Cu, Ni, Zn, Mn, Si, Ti; n: 1, 2). Dla większości badanych tlenków (o IE < 11 eV) Habilitantka potwierdziła w sposób ilościowy możliwość tworzenia połączeń jonowych. Stwierdziła natomiast, że SiO_2 posiada za wysoką energię jonizacji. Względem tego tlenku wybrany super-halogen $Mg_3F_7^*$ jest już za słabym utleniaczem, co w pewnym sensie neguje jego „magiczne” właściwości. Możliwość utlenienia SiO_2 do kationorodnika Pani dr Celina Sikorska obserwowała wcześniej, prowadząc badania teoretyczne z Panem prof. P. Skurskim dla neutralnych jednocentrowych super-halogenów $AlCl_4^*$ i AlF_4^* , które są zdolne zjonizować neutralne cząsteczki nawet o wysokiej energii jonizacji (IE > 12 eV) [**P13**].

Biorąc pod uwagę wady i ograniczenia anionów super-halogenowych, aktualnie stosowanych jako nieorganiczne elektrolity w bateriach litowo-jonowych, Habilitantka zbadła stabilność wielocentrowych super-halogenów anionowych typu $Mg_nF_{2n+1-2m}O_m^-$ (n: 2, 3; m: 0, 1, 2, 3), jako możliwych alternatywnych elektrolitów baterii litowo-jonowych (praca **H8**). Przebadane przez nią połączenia typu $[Li^+][Mg_nF_{2n+1-2m}O_m^-]$ są stabilne w środowisku wodnym, a obliczone parametry energetyczne, zwłaszcza dla $Mg_3F_7^-$, są korzystne w porównaniu z komercyjnymi elektrolitami, co sugeruje, że wybrany typ anionu super-halogenowego może być w przyszłości wykorzystany, jako elektrolit w bateriach litowo-jonowych.

Przeprowadzone przez Panią dr Celinę Sikorską badania teoretyczne i aplikacyjne dla nowych serii połączeń super-halogenowych (opublikowane w pracach **H1–H8**) wzbogacają, zarówno krajową bazę wiedzy dla układów przebadanych w Pracowni Chemii Kwantowej przez jej doktorantów i pracowników naukowych, jak również bazę ogólnościatową. Z punktu widzenia metodyki badań, Habilitantka korzystała między innymi z wcześniejszych doświadczeń własnych oraz innych pracowników Katedry Chemii Teoretycznej. Z kolei stosując wybrane metody chemii kwantowej, wykorzystwała programy obliczeniowe, w których te procedury są zawarte. Swoje własne koncepcje zastosowała w poszukiwaniach nowych układów jedno i wielocentrowych i ich izomerycznych struktur oraz w analizach możliwych dróg tworzenia i rozpadu badanych anionów super-halogenowych, zdobywając w ten sposób coraz większe doświadczenie naukowe w modelowaniu molekularnym głównie dla połączeń nieorganicznych.

Ostatni cykl 4 publikacji (**H9–H12**), który powstał przy współpracy z Panią prof. Nicolą Gaston, kiedy Pani dr Celina Sikorska przebywała na 4-letnim stażu na Uniwersytecie w Auckland (Nowa Zelandia), dotyczy badań naukowych dla super-alkaliów, ich struktur, właściwości redukujących, zastosowań, oraz możliwości tworzenia soli z super-halogenami. W badaniach nadal stosowała tylko metody teoretyczne, jednak w pracach **H9–H12** metodyka badań jest bardziej urozmaicona, niż w przypadku badań przeprowadzonych dla super-halogenów, co korzystnie wpłynęło na jej rozwój naukowy. Szkoda, że Habilitantka nie miała okazji na Uniwersytecie w Auckland uczestniczyć w eksperymentach dla super-atomów. Takie doświadczenie z pewnością poszerzyłoby jej horyzonty w badaniach teoretycznych.

Pani dr Celina Sikorska badała natomiast teoretycznie (**H9**) połączenia 3 klastrów metali przejściowych stabilizowanych przez ligandy PEt_3 z fulerenum C_{60} , które zsyntezowano kilka lat wcześniej, wyhodowano kryształy i zbadano ich struktury w laboratorium prof. N. Gaston. Stwierdzono, że struktury krystaliczne dwóch połączeń, $[Co_6Se_8(PEt_3)_6][C_{60}]_2$ i $[Cr_6Te_8(PEt_3)_6][C_{60}]_2$, naśladują struktury soli typu $[M^{+2}][X^-]_2$ i są podobne do struktury krystalicznej CdI_2 . Natomiast struktura krystaliczna trzeciego połączenia, $[Ni_9Te_6(PEt_3)_8][C_{60}]$ jest analogiczna do struktury kryształu $NaCl$, soli typu $[M^+][X^-]$. Wychodząc z geometrii struktur krystalicznych, Habilitantka zastosowała metody teoretyczne zarówno do oceny efektu

naśladowania cech metali przez klastry metali, jak również w celu wyjaśnienia ich właściwości redukujących. Do jakościowej oceny natury oddziaływań w badanych połączeniach 3 klastrów metali przejściowych Habilitantka zastosowała zarówno klasyczny jak i zmodyfikowany przez siebie model potencjału Lennarda-Jonesa. Dodatkowo wykazała elektrono-donorowy (nukleofilowy) charakter klastrów metali w oparciu o obliczenia energii jonizacji, potwierdzając ich naturę super-alkaliczną, zwłaszcza trzeciego klastra z Ni, dla którego IE jest mniejsze niż dla Cs. Z kolei C_{60} , pełniąc w badanych połączeniach rolę elektrono-akceptora (elektrofila), może być redukowany przez klaster metalu, który jednocześnie się utlenia. W konsekwencji reakcji utleniania i redukcji, może nastąpić przepływ elektronu z separacją ładunków (dodatniego i ujemnego) i mogą powstać sole o mniejszym lub większym charakterze jonowym, podobne do soli typu $[M^{+2}][X^{-}]_2$ i $[M^{+}][X^{-}]$.

W kolejnej pracy teoretycznej dla super-alkaliów (H10) Pani dr Celina Sikorska wykazała, że kation Cs^{+} można zastąpić kationem bimetalicznym o charakterze super-alkalicznym ($LiMg^{+}$, $NaMg^{+}$, $LiCa^{+}$ lub $NaCa^{+}$) w perowskicie $CsPbBr_3$, stosowanym w ogniwach słonecznych, przekształcających energię słoneczną w energię elektryczną. Wprowadzenie kationu super-alkalicznego korzystnie modyfikuje strukturę elektronową perowskitu. Kationy $LiMg^{+}$ i $NaMg^{+}$ o mniejszym promieniu jonowym mogą tworzyć stabilne perowskity o naturze półprzewodnikowej i małej przerwie energetycznej, niższej niż w $CsPbBr_3$. Natomiast z kationami $LiCa^{+}$ i $NaCa^{+}$ o większym promieniu jonowym można zbudować przewodniki metaliczne.

Oddziaływania neutralnych super-alkaliów z cząsteczkami CO_2 i N_2 oraz neutralnymi super-halogenami AlX_4^{+} ($X: F, Cl$) były przedmiotem badań Habilitantki w dwóch ostatnich pracach (H11 i H12). Jako neutralne super-alkalia wybrała stabilne połączenia wielocentrowe typu $N_4Mg_6M^{+}$ ($M: Li, Na, K$), które posiadają AEI niższe niż dla atomu Cs oraz silne właściwości elektrono-donorowe. Ich wspólną częścią składową jest klaster N_4Mg_6 o ciekawej strukturze przestrzennej podobnej do adamantanu. Habilitantka przebadła stabilność struktur neutralnych, anionowych i kationowych dla super-alkaliów i oszacowała odpowiednie parametry energetyczne jonizacji. Następnie wykazała, że neutralne super-alkalia $N_4Mg_6M^{+}$ są zdolne do zjonizowania obojętnej cząsteczki CO_2 , która w chemii pełni rolę słabego czynnika elektrofilowego (H11). W połączeniu jonowym, powstałym w wyniku przeniesienia elektronu od super-alkalium do CO_2 następuje aktywacja CO_2 połączona ze zmianą geometrii, zwłaszcza kąta O-C-O. Analogicznego zjawiska przeniesienia elektronu (procesu utleniania i redukcji) nie obserwowano dla połączenia super-alkaliów z cząsteczką neutralną N_2 , która charakteryzuje się bardzo niskim powinowactwem do elektronu. Połączenie super-alkaliów z N_2 jest związkiem addycyjnym o nie zjonizowanej strukturze.

Neutralne super-alkalia $N_4Mg_6M^{+}$ w wyniku oddziaływania z neutralnymi super-halogenami AlX_4^{+} mogą natomiast tworzyć trwałe jony super-sole typu $[N_4Mg_6M^{+}][AlX_4^{-}]$. Super-alkalium, działając jako reduktor w układzie $[D][A]$, może zredukować super-halogen, a super-halogen, działając jako utleniacz, może utlenić super-alkalium. W wyniku reakcji utleniania i redukcji może nastąpić przeniesienie elektronu z neutralnego super-alkalium do neutralnego super-halogeny z jednoczesną separacją ładunku dodatniego i ujemnego, co w konsekwencji prowadzi do powstania super-soli $[SA^{+}][SH^{-}]$. Dodatkowo Habilitantka zauważyła, że stosunek średnicy jonów SA^{+} i SH^{-} (dSA^{+}/dSH^{-}) może decydować o typie kryształu. Np. super-sól $[N_4Mg_6Li^{+}][AlCl_4^{-}]$ ma najniższą wartość tego stosunku i może tworzyć kryształy molekularne, natomiast dla super-soli $[N_4Mg_6Na^{+}][AlCl_4^{-}]$ i $[N_4Mg_6K^{+}][AlCl_4^{-}]$ te stosunki są większe i sole te mogą tworzyć upakowane super-atomowe sieci krystaliczne. Na podstawie analizy struktur elektronowych stwierdziła, że badane sole mogą też wykazywać zmienne właściwości fizyczne od półprzewodnika do metalu. Właściwości te można modyfikować, zmieniając atom litowca i/lub fluorowca.

Podsumowując, Pani dr Celina Sikorska zaprezentowała bardzo bogatą aktywność w postaci osiągnięcia naukowego składającego się z cyklu 12 tematycznie powiązanych artykułów H1-H12, opublikowanych w renomowanych czasopismach międzynarodowych z listy ministerialnej A. Można również do nich dodać sporą liczbę komunikatów ustnych i posterów, prezentowanych na konferencjach naukowych w Polsce i za granicą. W sposób nowatorski wykorzystwała metody chemii kwantowej do szerokiego spektrum zastosowań dla super-atomów. Przedstawione w dokumentacji osiągnięcie naukowe jest dowodem wyjątkowego poziomu Habilitantki. Jej aktywność naukowa zdecydowanie przekracza poziom uznany za wystarczający do uzyskania stopnia doktora habilitowanego.

Nie mam wątpliwości, że Pani dr Celina Sikorska wniosła nie tylko znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne, ale także rozwinęła swoje wrodzone talenty chemiczne poprzez badania teoretyczne atrakcyjnych układów chemicznych oraz możliwego szerokiego wachlarza ich zastosowań. Zdobyła dodatkowe doświadczenia w różnych specjalizacjach naukowych, takich jak chemia kwantowa, modelowanie molekularne, czy chemometria. Poznała również laboratorium zagraniczne i sposób prowadzenia tam badań naukowych. W mojej opinii cykl 12 publikacji spełnia kryterium indywidualnego wkładu Kandydatki ubiegającej się o uzyskanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne. Mam nadzieję, że uwagi natury interpretacyjnej, zamieszczone poniżej, Habilitantka weźmie pod uwagę zarówno w swoich własnych przyszłych pracach naukowych, jak i przyszłych pracach magisterskich i doktorskich, których będzie promotorem.

Uwagi ogólne dotyczące osiągnięcia naukowego

Mimo wyjątkowych osiągnięć Habilitantki i wysokiego poziomu zastosowanej metodyki do badań podstawowych i aplikacyjnych, mam niestety kilka uwag ogólnych natury interpretacyjnej, które w przyszłości mogą podnieść jakość jej nowych prac naukowych, a w szczególności prac magisterskich i doktorskich wykonywanych pod jej kierunkiem. Przede wszystkim mam ogólną uwagę do wzorów umieszczonych w publikacjach i autoreferacie. Generalnie przyjęto w chemii taką regułę, że dla atomu pierwiastka, który ma niesparowany elektron można pominąć znak rodniaka (*), pisząc jego symbol bez tego znaku (np. H, Li, B, F, Cl, itd.), ale tylko wtedy, gdy nie analizuje się mechanizmów procesów jonizacji. Natomiast, gdy pisze się wzory połączeń atomów należy już zaznaczyć, czy jest to cząsteczka obojętna ze sparowanymi elektronami (bez znaku neutralności), kation ze znakiem ładunku dodatniego (+), anion ze znakiem ładunku ujemnego (-), neutralny rodnik ze znakiem niesparowanego elektronu (*), kationorodnik z połączonym znakiem niesparowanego elektronu i ładunku dodatniego (**), czy też anionorodnik z połączonym znakiem niesparowanego elektronu i ładunku ujemnego (*-). W spektrometrii mass, chemii radiacyjnej, jak również w chemii dla związków organicznych i nieorganicznych nie można tych znaków pomijać, zwłaszcza gdy proponuje się mechanizmy tworzenia nowych, bądź rozpadu starych wiązań w cząsteczce. Podobnie jest w chemii kwantowej i obliczeniowej, gdy analizuje się procesy jonizacji, zwane reakcjami utleniania i redukcji, czy też cząstkowe procesy oddania lub dodania elektronu. Wszystkie znaki określające stan elektronowy badanego układu powinny być zaznaczone.

W opublikowanych artykułach i autoreferacie dla jasności należało uwzględnić wszystkie znaki dotyczące stanu elektronowego badanych struktur różnych form super-atomów. Np. neutralny super-halogen posiada nie sparowany co najmniej jeden elektron (SH^*) i przyłączając dodatkowy elektron staje się anionem ($SH^* + e \rightarrow SH^-$). Natomiast, jeśli napiszemy wzór super-halogenu jako SH (bez znaku stanu elektronowego), to proces jego jonizacji negatywnej ($SH + e \rightarrow SH^-$), może oznaczać, że prowadzi do anionorodnika, a nie anionu i może spowodować nieporozumienia między czytelnikami a autorem pracy. Ta sama uwaga o dokładności pisania struktur super-atomów i ich stanów elektronowych dotyczy wszystkich mechanizmów reakcji tworzenia i fragmentacji super-atomów oraz tworzenia form zjonizowanych dla połączeń [donor][akceptor]. Prawidłowo napisana struktura związku jest podstawą dobrej interpretacji wyników wszelkich badań, teoretycznych, kinetycznych, termochemicznych, elektrochemicznych, biochemicznych itp. oraz właściwego odbioru przez czytelników, w tym studentów zgłębiających poszczególne działy chemii i doktorantów analizujących współczesne trendy naukowe.

Z kolei konsekwencją braku równań pobrania elektronu (jonizacji negatywnej, inaczej redukcji) dla neutralnego super-halogenu i oddania elektronu (jonizacji pozytywnej, inaczej utleniania) dla neutralnego super-alkalium oraz odłączania elektronu od anionu super-halogenowego są duże skrótowe myślowe Habilitantki. Dodatkowo brak definicji obliczanych parametrów energetycznych, odpowiednio powinowactwa do elektronu (wertykalnego lub adiabatycznego) dla neutralnego super-halogenu, energii jonizacji (wertykalnej lub adiabatycznej) dla neutralnego super-alkalium, wertykalnego oddania elektronu dla anionu super-halogenowego itd., a także brak stosownych rysunków wyjaśniających te definicje prowadzi do przejęzyczeń popełnionych w osiągnięciu naukowym. Np. w kilku miejscach w autoreferacie Habilitantka stosuje naprzemiennie terminy „wertykalna energia odrywania elektronu (VDE)”, „energia wiązania nadmiarowego elektronu (też jako VDE)” i „powinowactwo do elektronu”. Definicje i wartości

tych parametrów energetycznych nie są identyczne. Dlatego ich naprzemienne używanie można zaliczyć nawet do błędów merytorycznych, które umniejszają wartość osiągnięcia naukowego.

Ponadto Habilitantka wielokrotnie pisze w autoreferacie i publikacjach o delokalizacji ładunku w super-atomie jonowym oraz o jego HOMO i LUMO. Pomija natomiast obliczenia i dyskusję na temat SOMO dla neutralnych super-atomów (np. w pracach **H4–H6**, **H9**, **H11**, **H12**). Brak jest też informacji, czy izomeryczne zmiany połączeń wielocentrowych, a także połączenia typu $[SA^*][A]$ lub $[D][SH^*]$ wpływają na SOMO. Jedynie w jednej pracy (**H7**) są raportowane SOMO dla kilku tlenków utlenionych do kationorodników w połączeniach z neutralnym super-halogenem $Mg_3F_7^*$. Analiza SOMO w neutralnych super-atomach, a następnie w adduktach $[D][A]$ mogłaby dostarczyć więcej informacji na temat ich charakteru (nie zjonizowanego lub zjonizowanego) niż porównanie z wielkościami energii jonizacji SA^* lub D oraz powinowactwa do elektronu A lub SH^* . Z kolei dyskusja na temat rozkładu gęstości spinu niesparowanego elektronu została włączona tylko w 3 artykułach (**H5–H7**). Dotyczy ona połączeń neutralnych super-halogenów $Mg_3F_7^*$ i MX_{k+1}^* (M : Li, Mg, Al.; X : F, Cl) z C_{60} w **H5** i **H6** oraz $Mg_3F_7^*$ z MeO (Me : Mg, Zn, Co, Cu, Ni) lub MeO_2 (Me : Mn, Si, Ti) w pracy **H7**.

Zwracam też uwagę na fakt, że właściwości utleniające mają reaktywne neutralne super-halogeny (SH^*), które łatwo mogą pobrać elektron ($SH^* + e \rightarrow SH^-$). Ich aniony (SH^-) takiej możliwości nie mają, mogą natomiast oddać elektron ($SH^- - e \rightarrow SH^*$), wykazując właściwości redukujące. Twierdzenie, że aniony mogą być czynnikami utleniającymi jest zatem nieodpowiednie (np. wstęp w **H4**). To samo dotyczy właściwości magicznych (utleniających) neutralnego super-halogenu $Mg_3F_7^*$. Jego anion już takich właściwości nie posiada (wstęp **H7**). Neutralne super-halogeny (SH^*) mogą utlenić neutralną cząsteczkę do kationorodnika, tak jak to Habilitantka odpowiednio zinterpretowała w **H5** i **H6** dla przypadku połączenia z C_{60} . Ale w **H7** dla połączeń z tlenkami interpretacja jest już niejasna. Super-halogen neutralny odbierając jeden elektron od obojętnego tlenku ($SH^* + e \rightarrow SH^-$) może utlenić tlenek tylko do kationorodnika ($MO_n - e \rightarrow MO_n^{*+}$), a nie kationu (MO_n^+). Analogicznie, niejasna interpretacja wyników zastała opublikowana wcześniej w pracy **P13** wspólnie z prof. P. Skurskim. Szczegółowa analiza SOMO w SH^* oraz adduktach z tlenkami z pewnością wyjaśniłaby strukturę elektronową oraz charakter stabilnych układów donorowo-akceptorowych.

Chciałabym także przypomnieć podstawowe wiadomości z chemii na temat CO_2 . Cząsteczka neutralna CO_2 nie jest chemicznie bierna, jak to napisała Habilitantka w autoreferacie. Z uwagi na większą elektroujemność tlenu niż węgla, wiązania CO w CO_2 są spolaryzowane. Wprawdzie moment dipolowy dla CO_2 jest równy zero (cząsteczka jest kwadрупolowa), ale atom węgla posiada cząstkowy ładunek dodatni i może zachowywać się jak słaby elektrofil. Np. w chemii organicznej stosuje się CO_2 (jako elektrofil) w reakcjach substytucji elektrofilowej w układach aromatycznych aktywowanych podstawnikami elektronodonorowymi, np. w syntezie kwasu salicylowego, wychodząc z fenolu lub fenolanu sodu (reakcja Kolbego). Z kolei cząsteczka azotu nie ma takich właściwości, nie ma spolaryzowanego wiązania i nie jest elektrofilem. Dlatego Habilitantka nie znalazła zjonizowanej struktury dla połączenia z neutralnym super-halogenem $[N_2MgM^*][N_2]$.

Nie widzę też potrzeby, stosowania w pracy **H1** nowej nazwy dla zależności liniowej, a mianowicie „ilościowa zależność między strukturą a właściwością” QSPR (*Quantitative Structure-Property Relationship*), a nie jak to było zaproponowane wcześniej QSAR (*Quantitative Structure-Activity Relationship*), gdzie aktywność może być rozumiana bardzo szeroko, również jako właściwość fizykochemiczna lub aktywność chemiczna. Oprócz tego, zastosowana w autoreferacie terminologia modelu matematycznego jest trochę sztuczna, np. zamiast terminu „współczynnik korelacji” Habilitantka używa termin „współczynnik determinacji modelu”, itp. Być może zmiany terminów są podyktowane programami antyplagiatowymi. Tego typu praktyki z terminologią stosowane są dość często we współczesnej literaturze chemicznej. Czasami zdarzają się nawet niewłaściwie zastosowane terminy, definiujące zupełnie co innego.

Mam też inne uwagi dotyczące autoreferatu. Moim zdaniem nie jest on starannie przygotowany. We wstępie dane na temat budowy i stanu elektronowego super-atomów są bardzo skąpe. Poza tym nie ma reakcji i definicji obliczanych parametrów energetycznych dla cząstkowych procesów jonizacji oraz przeniesienia elektronu, czyli reakcji utleniania i redukcji w układach $[D][A]$, które Habilitantka analizowała.

W autoreferacie są też błędy edytorskie, nawet we wzorach chemicznych (np. Rys. 6, błędne są wzory anionów dwucentrowych). Zdarzają się także powtórzenia. Niektóre informacje są umieszczone w nieodpowiednich rozdziałach (np. współpraca z innymi pracownikami UG zamieszczona jest w rodz. 5 dotyczącym aktywności naukowej w innych Uczelniach, w tym zagranicznych). Wszystkie wymienione powyżej uwagi umniejszają tylko jakość osiągnięcia naukowego. Nie wpływają jednak na jego ogólną pozytywną ocenę.

Ocena sumarycznego dorobku naukowego

Spośród 35 artykułów naukowych umieszczonych w wykazie dorobku naukowego dr Celiny Sikorskiej, 32 prace zostały opublikowane w prestiżowych czasopismach zagranicznych załączonych w bazie czasopism *Journal Citation Reports* (JCR), natomiast 3 prace zostały wydrukowane w czasopismach publikujących materiały konferencyjne. W większości artykułów (26) Habilitantka jest pierwszym autorem. W dorobku Habilitantki są również artykuły mono-autorskie (9). W swojej aktywności naukowej wykazała również 1 wykład konferencyjny na zaproszenie, wygłoszony na symposium w Nowej Zelandii, 8 ustnych komunikatów i 27 posterów prezentowanych na konferencjach w kraju (18) i za granicą, m.in. w Nowej Zelandii (7), Hiszpanii (2), Włoszech (2), Meksyku (2), Korei Południowej (1), Kanadzie (1), Wietnamie (1), Słowacji (1) i Węgrzech (1). W większości prezentowała je samodzielnie.

Pierwsze 10 artykułów naukowych Habilitantki zostało opublikowanych w latach 2008–2012 w renomowanych czasopismach zagranicznych, takich jak *Inorganic Chemistry* (2 prace), *Journal of Physical Chemistry A* (2), *Chemical Physics Letters* (4), *Molecular Physics* (1) oraz *Journal of Theoretical and Computational Chemistry* (1) oraz 1 komunikat konferencyjny w *Current Topics in Biophysics*. Były one efektem 6-cio letnich intensywnych badań naukowych Habilitantki, prowadzonych pod kierunkiem Pana prof. P. Skurskiego. Dotyczą one głównie super-halogenów, analizy ich struktury, trwałości, izomeryzacji oraz jonizacji poprzez zastosowanie różnych metod chemii kwantowej. Oprócz wymienionych publikacji, większa część tych badań była tematem jej pracy magisterskiej i później rozprawy doktorskiej. W badaniach tych można już zauważyć pewną samodzielność Habilitantki w pracy naukowej na podstawie zajmowanej przez nią pierwszej pozycji w spisie autorów w 10 publikacjach z 11 (91%).

Kolejne 4 artykuły, opublikowane w latach 2015–2018 w *Nanotechnology* (2 prace), *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (1) i *Beilstein Journal of Nanotechnology* (1), oraz 1 monoautorski komunikat konferencyjny zamieszczony w *Proceedings of the 3rd World Congress on Recent Advances in Nanotechnology* powstały po doktoracie i były owocem badań naukowych Habilitantki, prowadzonych pod kierunkiem Pana prof. dr hab. Tomasza Puzyna z Instytutu Ochrony Środowiska i Zdrowia Człowieka UG. Jeszcze w czasie stażu podoktorskiego, biorąc udział jako wykonawca w kilku międzynarodowych projektach naukowych, Habilitantka zdobyła odpowiednie doświadczenie i wiedzę w przydatności metod chemii kwantowej i chemometrii do badania właściwości fizykochemicznych nanocząsteczek. Konsekwencją tych doświadczeń było opracowanie ilościowych metod analizy. Była już wtedy zatrudniona na Wydziale Chemii UG na etacie adiunkta naukowego. Zaproponowała i przetestowała algorytmy matematyczne do modelowania właściwości nanocząsteczek, oparte na analizie korelacyjnej. Analogiczne modele zastosowała także do super-halogenów. Na tym etapie pracy zawodowej rozpoczęła już samodzielną pracę naukową, która stała się załącznikiem jej osiągnięcia naukowego zaprezentowanego we wniosku złożonym w RDN.

Angażując się równolegle w prace badawcze zespołu Pana prof. dr hab. Piotra Stepnowskiego oraz Pani dr hab. Anny Białk-Bielińskiej z Katedry Analizy Środowiska Wydziału Chemii UG, którzy współpracują z prof. dr hab. Pawłem Wiczlinga z Zakładu Biofarmacji Farmakologii Wydziału Farmaceutycznego Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego, Habilitantka wykazała możliwości zastosowania metod chemii kwantowej i chemometrii do badania w sposób ilościowy termochemii równowag kwasowo-zasadowych dla złożonych terapeutyków. W 2017 roku została opublikowana praca naukowa w *Trends in Analytical Chemistry*, łącząca metody doświadczalne z teoretycznymi dla związków organicznych stosowanych w terapii przeciwnowotworowej. Ponadto, Habilitantka zastosowała metody teoretyczne w kolejnej pracy, gdy zaangażowała się w badania prowadzone przez Pana prof. P. Stepnowskiego przy współpracy z grupą prof. Danuty Leszczyńskiej (*Interdisciplinary Center for Nanotoxicity, Jackson State University, USA*). Połączenie

wyników metod eksperymentalnych i obliczeniowych doprowadziło do ciekawych wniosków nt. możliwości usuwania ze środowiska kancerogennych policyklicznych węglowodorów aromatycznych. Badania te zostały wspólnie opublikowane w 2018 roku w *Water, air, and soil pollution*.

Kolejny cykl zespołowych badań naukowych Habilitantki, prowadzonych na Wydziale Chemii UG dotyczy jej współpracy z Panem prof. dr hab. Adamem Liwo z Katedry Chemii Teoretycznej. Badania te obejmują modelowanie struktur dużych układów biochemicznych, jakimi są białka z wykorzystaniem teoretycznych modeli i algorytmów w ogólnoświatowych eksperymentach CASP (*Experiment on the Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction*). Owocem tych testów naukowych są 3 pojedyncze artykuły opublikowane w latach 2019–2020 w *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* oraz *Journal of Chemical Information and Modeling*. Ostatnio w 2022 roku Habilitantka już indywidualnie z prof. A. Liwo opublikowała bardzo interesujący artykuł w *Journal of Physical Chemistry B*. Jest to praca łącząca doświadczenia dwóch chemików teoretyków, jednego uznanego w świecie specjalisty, z ogromnym doświadczeniem naukowym i drugiego młodszego specjalisty zdobywającego doświadczenie w projektowaniu modeli matematycznych i algorytmów do badań strukturalnych nie tylko dla małych połączeń, jakimi są fragmenty aminokwasów i peptydów, ale także dla wielkich polimerycznych białek. Artykuł ten został opublikowany w specjalnym zeszycie czasopisma ACS z okazji 100-letnich urodzin Pana prof. Harolda Scheragi, u którego kilku pracowników Wydziału Chemii UG odbywało staże naukowe, a z którym od wielu lat współpracuje Pan prof. A. Liwo.

Ostatni cykl badań naukowych obejmuje już artykuły (ocenione powyżej), które Habilitantka wybrała do przedstawienia osiągnięcia naukowego we wniosku o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne, złożonym w RDN w Warszawie. Ten cykl badań jest zbiorem 12 tematycznie powiązanych artykułów, opublikowanych w prestiżowych czasopismach zagranicznych załączonych w bazie czasopism *Journal Citation Reports (JCR)*.

Sumaryczny dorobek naukowy Pani dr Celiny Sikorskiej jest bardzo bogaty i różnorodny zarówno pod względem zastosowanych współczesnych metod chemii kwantowej i chemometrii, jak również badanych struktur związków chemicznych i ich właściwości fizykochemicznych. Habilitantka nie tylko przyjmuje propozycje wspólnych badań teoretycznych metodami chemii kwantowej, ale również odważnie podejmuje się analiz wyników badań eksperymentalnych i teoretycznych za pomocą metod matematycznych i statystycznych. Moim zdaniem jej sumaryczne osiągnięcia naukowe reprezentują wysoki poziom zastosowanej metodyki i dobrze wpisują się w międzynarodowy rozwój chemii teoretycznej. Jednocześnie spełniają wymagania stawiane kandydatom ubiegającym się o stopień naukowy doktora habilitowanego w dyscyplinie nauki chemiczne.

Informacja o współpracy z innymi ośrodkami krajowymi i zagranicznymi

Pani dr Celina Sikorska wykazała się istotną aktywnością naukową w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej. W czasie stażu podoktorskiego uczestniczyła w międzynarodowym projekcie, finansowanym w ramach 7 Programu Ramowego UE i odbyła pierwszy krótki zagraniczny staż naukowy w Japonii (*National Institute for Environmental Studies (NIES), Research Center for Environmental Risk, Tsukuba*) w grupie kierowanej przez dr Noriyuki Suzuki pod koniec 2014 roku.

Podczas dłuższego pobytu na Uniwersytecie Auckland w Nowej Zelandii w grupie prof. Nicoli Gaston (2019–2023) brała udział w projektach naukowych realizowanych na Wydziale Fizyki tego Uniwersytetu, m.in. we współpracy z *MacDiarmid Institute for Advanced Materials and Nanotechnology* (Wellington, Nowa Zelandia) oraz *Institut für Anorganische Chemie Universität Tübingen* (Tübingen, Niemcy). Owocem tej współpracy są m.in. publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego przedstawionego w dokumentacji oraz prezentacje na międzynarodowych konferencjach naukowych.

Pracując na Wydziale Chemii UG razem z Panem prof. dr hab. P. Stepnowskim z Katedry Analizy Środowiska Wydziału Chemii UG mogła współpracować z zespołem prof. D. Leszczyńskiej z *Interdisciplinary Center for Nanotoxicity, Jackson State University* (Stany Zjednoczone). Natomiast współpracując z Panem prof. dr hab. A. Liwo z Katedry Chemii Teoretycznej Wydziału Chemii UG mogła

uczestniczyć w ogólnościowych eksperymentach CASP (*Experiment on the Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction*). Ponadto wspólnie z zespołem Pani dr hab. A. Białk-Bielińskiej z Katedry Analizy Środowiska Wydziału Chemii UG mogła współpracować z prof. dr hab. P. Wiczlinga z Zakładu Biofarmacji Farmakokinetyki Wydziału Farmaceutycznego Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego. Efektem tych prac zespołowych są artykuły opublikowane w dobrych czasopismach zagranicznych.

Współpracując z różnymi ośrodkami naukowymi w kraju i za granicą, Pani dr Celina Sikorska podejmowała bardzo różnorodną tematykę badań naukowych. We wszystkich tych badaniach z powodzeniem stosowała metody kwantowo-chemiczne do rozwiązywania problemów strukturalnych lub przewidywania różnorodnych właściwości badanych układów, takich jak właściwości fizykochemiczne, biochemiczne i farmakologiczne, udowadniając tym samym, że jest już specjalistą, zarówno w projektowaniu badań, jak i zastosowaniu w nich metod chemii kwantowej i chemometrii. Współpraca z krajowymi i zagranicznymi zespołami oraz afiliacje zagraniczne w 4 artykułach naukowych w pełni spełniają wymagania stawiane kandydatom ubiegającym się o stopień doktora habilitowanego.

Ocena aktywności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzującej naukę

Pani dr Celina Sikorska, w ramach studiów doktoranckich prowadziła zajęcia dydaktyczne zgodne z jej specjalizacją naukową. Były to seminaria z chemii kwantowej oraz ćwiczenia laboratoryjne z technologii informacyjnej. Później zatrudniona na Wydziale Chemii UG na stanowisku adiunkta naukowego (2013–2019 i od marca 2023) nie miała i nie ma przydzielonego pensum dydaktycznego. Jej dorobek na tym polu jest zatem bardzo ubogi, ale wynika głównie z charakteru zatrudnienia. Na Wydziale Chemii UG Habilitantka prowadziła jedynie (w formie wolontariatu) ćwiczenia laboratoryjne z chemii ogólnej i nieorganicznej dla kierunku Oceanografia. Była także opiekunem pracy magisterskiej. Planowane są trzy kolejne prace magisterskie, które będą realizowane w ramach otrzymanych przez Habilitantkę grantów naukowych. Zgodnie z dokumentacją Habilitantki, większymi obowiązkami dydaktycznymi (1/5 etatu) została obciążona dopiero podczas stażu w Nowej Zelandii. Na Uniwersytecie w Auckland prowadziła zajęcia na studiach pierwszego i drugiego stopnia zgodne z jej specjalizacją naukową. Były to wykłady z mechaniki kwantowej oraz fizyki materii skondensowanej. Prowadziła także wykłady i seminaria z zaawansowanej mechaniki statystycznej i materii skondensowanej. W latach 2020–2023 powierzono jej również funkcję promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim. Świadczy to o jej wysokich kwalifikacjach akademickich, jakie dostrzegli tam jej współpracownicy naukowcy oraz uznały władze Uniwersytetu.

Aktywność organizacyjna Habilitantki na rzecz macierzystej Uczelni również jest bardzo uboga. Brała jedynie udział w organizacji Dni Otwartych Wydziału Chemii UG dla uczniów szkół podstawowych i średnich w 2018 i 2023 roku. Znacznie więcej obowiązków organizacyjnych powierzyły jej władze Uniwersytetu w Auckland w Nowej Zelandii. Habilitantka brała udział w pracach różnych zespołów uczelnianych, m.in. zespołu ds. dydaktyki, opracowującego koncepcję i plan zajęć kierunkowych, zespołu ds. niepełnosprawności, a także zespołu, opracowującego strategię rozwoju i wsparcia Młodych Naukowców Wydziału Nauk Ścisłych. Ponadto brała udział w współtworzeniu sieci kobiet i zróżnicowania płci oraz sieci kobiet w naukach ścisłych.

Wyróżniająca jest natomiast działalność organizacyjna Habilitantki, związana z pracą naukową na Wydziale Chemii UG oraz na Uniwersytecie w Auckland w Nowej Zelandii, taka jak przygotowanie i złożenie projektów badawczych w celu pozyskania środków finansowych na ich realizację, a także organizacja i wykonanie zaplanowanych badań przez wykonawców po uzyskaniu grantów. Sprawując dodatkowo funkcję recenzenta w ośmiu czasopismach naukowych (*Structural Chemistry* i *Chemical Physics Letters* od 2018 roku, *Frontiers in Chemistry* i *AIP Advances* od 2021 roku, *Communications Chemistry* i *AIMS Mathematics* od 2022 roku oraz *Physica Scripta* i *Journal of Molecular Graphics and Modelling* od 2023 roku), Habilitantka zrecenzowała w sumie jedenaście artykułów naukowych.

Dodatkowo, Habilitantka wykazała w swojej dokumentacji działalność związaną z popularyzacją nauki. Pani dr Celina Sikorska promuje nauki ścisłe, a zwłaszcza chemię wśród dzieci i młodzieży podczas Dni Otwartych Wydziału Chemii UG. Natomiast tematykę i aktualne wyniki naukowe dla super-atomów promuje na różnych stronach internetowych.

Na podstawie powyższych aktywności dydaktycznych, organizacyjnych i popularyzatorskich Habilitantki mogę stwierdzić, że są wystarczające i spełniają wymagania stawiane kandydatom ubiegającym się o stopień doktora habilitowanego.

Wniosek końcowy

Biorąc pod uwagę wszystkie aktywności naukowe, dydaktyczne i organizacyjne zamieszczone w dokumentacji nie mam wątpliwości, że Pani dr Celina Sikorska jest bardzo dobrze przygotowana do prowadzenia samodzielnej pracy naukowej, a zwłaszcza do kierowania pracami magisterskimi oraz pełnienia funkcji promotora prac doktorskich. Jest odpowiednio doświadczonym pracownikiem naukowym, który jest zdolny sformułować interesujący i atrakcyjny problem badawczy, posiada własne ciekawe koncepcje naukowe, a także po uwzględnieniu moich uwag ogólnych będzie mogła jasno interpretować wyniki przyszłych badań naukowych prowadzonych dla super-atomów. Poza tym posiada wyjątkowy talent w pozyskiwaniu środków finansowych na prace badawcze. W swojej dokumentacji wykazała również, że może prowadzić zajęcia dydaktyczne (wykłady, ćwiczenia i seminaria) w języku polskim i angielskim na studiach różnego stopnia, zarówno w polskiej jak i zagranicznej Szkole Wyższej. Może również brać aktywny udział w różnego typu komisjach wydziałowych i uczelnianych.

Jej osiągnięcia naukowe oceniam pozytywnie. Metodyka badań teoretycznych zawartych w cyklu 12 tematycznie powiązanych publikacji reprezentuje poziom prac europejskich, który może rywalizować z poziomem prac amerykańskich. Habilitantka posiada duże doświadczenie w badaniach teoretycznych, a zwłaszcza w wykorzystaniu metod chemii kwantowej do rozwiązywania różnorodnych kwestii strukturalnych, fizykochemicznych i aplikacyjnych. Cykl 12 publikacji, stanowiących osiągnięcia naukowe, w tym wybór i dokładne zbadanie wielu serii nowych połączeń super-atomów oraz możliwości ich zastosowań wnoszą istotny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemicznej. Ogólne uwagi natury interpretacyjnej oraz uwagi szczegółowe, wymienione powyżej, obniżają nieznacznie wartość osiągnięcia naukowego. Nie mają jednak wpływu na ogólną pozytywną ocenę całego dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego Habilitantki.

Zgodnie z udostępnioną mi dokumentacją, Pani dr Celina Sikorska spełnia wszystkie trzy warunki formalne zawarte w art. 219 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku (Dz. U. z 2023 r. poz. 742 z późn. zm.) stawiane kandydatom dążącym do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego *((1) posiada stopień naukowy doktora uzyskany na podstawie przepisów obowiązujących w polskim systemie prawa, (2) posiada w dorobku osiągnięcia naukowe, stanowiące znaczny wkład w rozwój dziedziny nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemicznej; wszystkie artykuły osiągnięcia naukowego są oryginalne i nowatorskie oraz zostały opublikowane w czasopiśmie naukowym wydanych przez ACS (American Chemical Society), RCS (Royal Chemical Society), Elsevier'a, Wiley'a i Springer'a, które mają zasięg międzynarodowy, (3) wykazuje się istotną aktywnością naukową, realizowaną podczas zatrudnienia nie tylko w macierzystej uczelni (Uniwersytet Gdański), ale także w uczelni zagranicznej (University of Auckland, Nowa Zelandia) podczas długiego 4-letniego pobytu naukowego, którego owocem są publikacje z afiliacją zagraniczną).*

Nadmieniam, że Pani dr Celina Sikorska nie ubiegała się wcześniej o nadanie jej stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Podsumowując, pozytywna ocena całokształtu osiągnięć naukowych, dydaktycznych i organizacyjnych Pani dr Celiny Sikorskiej upoważnia mnie do poparcia jej wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Jednocześnie rekomenduję kontynuowanie dalszych czynności postępowania habilitacyjnego odpowiednio przed Komisją Habilitacyjną, a następnie przed samą Radą Dyscypliny Nauki Chemicznej UG.

Ewa D. Raczynska

Prof. dr hab. Ewa Daniela Raczynska