



Recenzja

wniosku dr Celiny Sikorskiej o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Uzyskanie stopnia doktora habilitowanego związane jest przede wszystkim z wypełnieniem wymogów *ustawowych* określonych w art. 219, punkt 1 Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. Środowisko naukowe oczekuje ponadto spełnienia innych warunków, które można określić mianem *zwyczajowych*. Jak rozumiem ostatnie wytyczne dotyczące recenzji wniosków „habilitacyjnych”, oceniający powinni się skoncentrować na art. 219.2, punkt 1 rozdz. 3, Ustawy i odnieść się do doskonałości naukowej kandydatki lub kandydata pozostawiając dyskusję dotyczącą wypełnienia pozostałych wymogów ustawowych na czas obrad Komisji. Niemniej, w niniejszej recenzji odnoszę się do wszystkich elementów podlegających ocenie aby ułatwić przyszłą dyskusję.

Wymogi ustawowe:

1. W roku 2012 Kandydatka uzyskała w macierzystej instytucji stopień doktora co wypełnienia wymóg art. 219.1, punkt 1 Ustawy.
3. Na poparcie tezy o istotnej aktywności naukowej w niemacierzystej instytucji Kandydatka w punkcie 3 autoreferatu przedstawiła informację o prowadzeniu pracy naukowej na uniwersytecie w Auckland w okresie ponad czteroletnim, którą kontynuuje (jak rozumiem zdalnie) jako adiunkt bez wynagrodzenia. Z dalszego opisu działalności Kandydatki w sposób jednoznaczny wynika, że już tylko ten okres prowadzenia badań naukowych w Nowej Zelandii znamienicie wyczerpuje wymóg określony w art. 219.3, punkt 1 Ustawy (co mnie bardzo cieszy, gdyż pięciomiesięczny staż podoktorski który Kandydatka odbyła w macierzystej Uczelni trudno uznać za aktywność spełniającą ten wymóg Ustawy). Ponadto, zgodnie z informacją przedstawioną w punkcie 5 Wykazu osiągnięć naukowych Kandydatka odbyła ponad roczny staż podoktorski w Narodowym Instytucie Badań Środowiskowych w Tsukubie co tylko wzmacnia moją opinię wyrażoną powyżej.
2. Jako osiągnięcie naukowe o znaczącym wkładzie w rozwój dyscypliny, Kandydatka przedstawiła cykl 12 powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopiśmie o światowym obiegu, zatytułowany "Zaprojektowanie i zbadanie metodami chemii kwantowej superatomów do zastosowań jako silne czynniki redoks". Cykl obejmuje (w zaproponowanej przez Kandydatkę kolejności):





Politechnika Łódzka

Instytut Techniki Radiacyjnej

Profesor dr hab. Piotr Paneth

Wniosek dr Sikorskiej

strona 2

- publikację, która ukazała się w *Chem. Phys. Lett.* w 2015 roku. Został w niej przedstawiony wynik ilościowej zależności właściwości - struktura opartej jedynie na dwóch deskryptorach, który pozwolił Kandydatce na opisanie związku powinowactwa elektronowego superhalogenów z rodzajem ligandów i mas atomowych,
- publikację, która ukazała się rok później w *RSC Adv.*, w której wykorzystując wysoki poziom teorii - OVGf/6-311++G(3df,3pd)+ECP (co było możliwe do osiągnięcia dzięki niewielkiemu rozmiarowi badanych układów) udowadnia, że atomy Kr, Xe, czy Rn mogą stanowić atom centralny jonu superhalogenowego,
- pracę z 2015 roku opublikowaną w *Chem. Phys. Lett.* dotyczącą wykorzystania grup OF jako ligandów superhalogenów. Według Kandydatki jest to pierwszy opis takich indywiduów,
- nieco bardziej złożoną strukturę Kandydatka opisała w publikacji z 2019 roku w *J. Chem. Inf. Model.*, a mianowicie ponownie wykorzystanie grup OF jako ligandów ale tym razem z dwoma lub trzema atomami magnezu,
- rok wcześniej opublikowaną w *Int. J. Quant. Chem.* na temat możliwości wykorzystania klastra Mg_3F_7 jako nanomateriału poprzez jego związanie z fulerem C_{60} . Na podstawie bardzo wysokich energii oddziaływań pomiędzy tymi związkami Kandydatka wysuwa tezę o możliwości praktycznego otrzymania takich materiałów, które powinny się charakteryzować wysokim stopniem przeniesienia gęstości elektronowej z fulerenu na superhalogen,
- publikację z 2016 roku, która ukazała się w *PCCP* i również dotyczy możliwości tworzenia nanocząstek w wyniku oddziaływania superhalogenu z fulerem C_{60} . W badaniach został uwzględniony szereg superhalogenów jednakże na niższych poziomach teorii opartych o funkcjał B3LYP i funkcję bazy 6-31+G(d) co powoduje, że uzyskane wyniki są nieco mniej wiarygodne,
- publikację w *J. Phys. Chem. A* z 2018 roku, w której Kandydatka opisuje badania oddziaływań superhalogenu Mg_3F_7 z tlenkami metali i konkluduje, że takie kompleksy charakteryzują się silnym związaniem w wyniku przeniesienia elektronu z tlenku na superhalogen,
- pracę z 2019 roku opublikowaną w *ChemPhysChem*, w której Kandydatka przedstawia badania nakierowane na ocenę możliwości wykorzystania badanych przez nią superhalogenów do wytwarzania baterii litowo-jonowych i konkluduje, że wszystkie rozpatrywane struktury są wystarczająco trwałe aby warto było pokusić się o sprawdzenie doświadczenie ich praktycznego zastosowania,
- pracę z 2021 roku opublikowaną w *J. Comput. Chem.* o odmiennym od poprzednich charakterze. Po pierwsze, jest to pierwsza niemonoautorska publikacja (choć Kandydatka pozostaje pierwszym i korespondującym autorem). Jest to również pierwsza w cyklu publikacja nie wsparta grantem badawczym (oprócz oczywistych dla badań obliczeniowych grantów na czas superkomputerów – w tym przypadku zarówno w ramach PL-GRID jak i sieci nowozelandzkiej). Jest





Politechnika Łódźka

Instytut Techniki Radiacyjnej

Profesor dr hab. Piotr Paneth

Wniosek dr Sikorskiej

strona 3

to wreszcie pierwsza praca bez polskiej afiliacji (w poprzedniej wykazane zostały dwie afiliacje). Tematycznie publikacja ta również odstaje nieco od poprzednich gdyż dotyczy modyfikacji potencjału Lennarda-Jonesa w celu zastosowania go do układów nanoskalowych. Podobnie ma się sytuacja z pozostałymi trzema artykułami, które zostały opublikowane przy współautorstwie prof. Nicoli Gaston i są w związku z pobytem stażowym Kandydatki afiliowane do (i wspierane finansowo przez) uczelnię w Nowej Zelandii,

- pracę z 2021 roku opublikowaną w *J. Chem. Phys.*, w której opisane zostały badania nakierowane na ocenę możliwości zastąpienia w ogniwach perowskitowych jonów cezu przez bimetaliczne kationy superalkaliczne,
- pracę z 2020 roku również opublikowaną w *J. Chem. Phys.*, w której znalazły się badania nakierowane na wykorzystanie superalkaliów w celu aktywacji ditlenku węgla. Znaleziono zależność pomiędzy IE superalkaliów a przeniesieniem elektronu na CO₂ i tym samym jego aktywację,
- oraz publikację w *PCCP* z ubiegłego roku dotyczącą właściwości molekularnych związków superalkalia-superhalogeny. W pracy tej wykazano podatność zmian strukturalnych ma zmianę pojedynczego atomu.

Badania przedstawione w pierwszych ośmiu publikacjach były wsparte grantami MNiSW, NCN i FNP. Wszystkie artykuły zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach naukowych o światowym obiegu. Mam pewne wątpliwości co do doboru ich kolejności w opisie osiągnięcia oraz celowości umieszczenia wszystkich z nich w cyklu (co w moim przekonaniu umniejsza wagę osiągnięcia – pominięcie kilku z „nowozelandzkiej” serii znacząco by podkreśliło monotematyczność cyklu, dając jednocześnie jasną wskazówkę co do dalszych planów badawczych Kandydatki). Pewną ułomnością jest też brak odniesienia do rzeczywistych wyników doświadczanych (być może to moje przeoczenie) - w badaniach obliczeniowych konieczne jest pokazanie, że prowadzone badania (w tym w szczególności metodyka obliczeniowa) dają wyniki zgodne z doświadczeniem. Niemniej przedstawiony cykl bez żadnej wątpliwości spełnia kryterium powiązania tematycznego i wzbogaca poszukiwania możliwości zarówno zastosowania superjonów jak i ich opisu teoretycznego. Wiodąca rola dr Sikorskiej w tych badaniach nie ulega wątpliwości. Dlatego uważam, że przedstawiony cykl wyczerpuje wymogi określone art. 219.2b, punkt 1 Ustawy.

W świetle przedstawionych powyżej faktów stwierdzam, że w moim przekonaniu **dr Celina Sikorska spełnia wymogi ustawowe stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego.**





Wymogi zwyczajowe:

Przechodząc do pozaustawowych (zwyczajowych) oczekiwań środowiska naukowego wobec kandydatów do stopnia doktora habilitowanego pozytywnie oceniam:

1. *Pozyskiwanie funduszy na badania.* Niezależność naukowa wymaga umiejętności pozyskiwania finansowania prowadzonych badań naukowych. Osiem monoautorskich publikacji wchodzących w skład osiągnięcia było wspierane grantami MNiSW, FNP i NCN. Po uzyskaniu stopnia doktora Kandydatka kierowała siedmioma grantami, w tym zagranicznymi. Powyższe informacje jasno wskazują, że dr Sikorska potrafi zdobywać fundusze na wsparcie swoich badań, a ponadto ponownie podkreśla ich atrakcyjność naukową w świetle niskiego poziomu sukcesu aplikacyjnego, jaki cechuje od dłuższego czasu konkursy o wsparcie badań naukowych, w szczególności w zakresie badań podstawowych.
2. *Działalność dydaktyczną.* Jak na osobę zatrudnioną na etacie naukowo-badawczym Kandydatka może poszczycić się prowadzeniem zajęć na zasadzie wolontariatu. Pełniła również funkcję promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim. Dopiero na uniwersytecie w Auckland podjęła obowiązki dydaktyczne prowadząc serie wykładów.
3. *Działalność na rzecz otoczenia.* W zakresie upowszechniania nauki Kandydatka opublikowała w Internecie artykuł oraz wygłosiła wykład na sympozjum, które przybliżyły szerszemu gronu odbiorców jej tematykę badawczą. Jest współorganizatorką (ponownie jako wolontariuszka) propagowania nauki wśród lokalnej młodzieży poprzez Dni Otwarte Wydziału Chemii UG. Zaangażowanie w prace zespołów ds. równości płci czy ds. niepełnosprawności wykazywała również podczas pobytu w Nowej Zelandii.

Nieco bardziej krytyczny jestem w stosunku do:

4. *Planów przyszłej pracy badawczej.* Kandydatka deklaruje kontynuowanie badań superalkaliów, na co uzyskała już wsparcie finansowe. Nieco niepokojący jest całkowity brak cytowań publikacji Kandydatki, które ukazały się po uzyskaniu stopnia doktora. Być może tematyka jest zbyt niszowa. Mam jednak nadzieję, że najnowsze prace, nakierowane na problemy praktyczne (nanostruktury, baterie litowo-jonowe, czy aktywacja ditlenku węgla), są na tyle nowe, że po prostu jeszcze nie zdążyły znaleźć się w obiegu literaturowym.





Politechnika Łódzka

Instytut Techniki Radiacyjnej

Profesor dr hab. Piotr Paneth

Wniosek dr Sikorskiej

strona 5

Podsumowując uważam, że przedstawiony mi do oceny dorobek naukowy oraz osiągnięcie naukowe, wsparte aktywnością dydaktyczną i organizacyjną Kandydatki spełniają wymagania formalne i zwyczajowe uwzględniane w tego typu postępowaniach. Dlatego **niniejszym przedstawiam** wysokiej Radzie Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Gdańskiego **moje poparcie wniosku o nadanie dr Celinie Sikorskiej stopnia doktora habilitowanego.**

Łódź, dn. 17 grudnia 2023 r.



90-924 Łódź, ul. Żeromskiego 116, Poland

tel: +4842 631 31 99, 042 631 31 88, fax: +4842 636 50 08, e-mail: paneth@p.lodz.pl, web: www.mitr.p.lodz.pl