



POLITECHNIKA WARSZAWSKA  
WYDZIAŁ CHEMICZNY  
Prof. Adam Pron

ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa  
Tel./fax: +48-222345584/ +48-22-2347271;  
e-mail: apron@ch.pw.edu.pl



Warszawa 25. 01. 2021

**Ocena osiągnięcia naukowego, ogólnego dorobku badawczego oraz działalności  
dydaktycznej i organizacyjnej dr Marleny Gryl**

(w związku z Jej przewodem habilitacyjnym prowadzonym przez Radę Dyscypliny Nauki  
Chemiczne Uniwersytetu Jagiellońskiego)

**Uwagi ogólne.**

Marlena Gryl jest absolwentką Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, gdzie w 2007 r. obroniła pracę magisterską dotyczącą badań polimorfizmu w kokryształach mocznika i kwasu barbiturowego. Efektem tych badań była Jej pierwsza i, jak dotąd, najczęściej cytowana publikacja (*Acta Crystallographica Section B* 64, 623-632 (2008), 34 cytowania niezależne).

Bezpośrednio po dyplomie Kandydatka rozpoczęła studia doktoranckie na swojej macierzystej uczelni w grupie badawczej Katarzyny Stadnickiej, które ukończyła w 2011 r. broniąc pracy doktorskiej pt. „*Crystal Engineering of Materials with Prospective Non-linear Optical Properties*”. Przed obroną doktoratu opublikowała trzy prace, wszystkie w *Acta Crystallographica Section E*. Po doktoracie Marlena Gryl opublikowała 26 artykułów, z których 11 przedstawiła jako swój dorobek habilitacyjny. Do zbioru tego dodała rozdział zatytułowany „*Qualitative and quantitative crystal engineering of multi-functional co-crystals*” stanowiący część monografii pt. „*Multi-component crystals: synthesis, concepts, function*” De Gruyer (2018). Tematyka większości tych publikacji wyraźnie pokazuje, że osiągnięcie habilitacyjne jest twórczą kontynuacją badań przedstawionych w doktoracie. Pozostałych 15 artykułów jest wynikiem współpracy Kandydatki z chemikami organikami syntezującymi nowe elektroluminofoery, chemikami zajmującymi się związkami kompleksowymi czy wytwarzającymi organiczno-nieorganiczne materiały hybrydowe. We wszystkich tych przypadkach wykorzystywano Jej kompetencje w dziedzinie krystalografii.

Sumarycznie, 30 artykułów naukowych Habilitantki miało, jak dotąd, 160 cytowań niezależnych, czyli takich cytowań, w których zbiory cytujących i cytowanych są rozłączne. 38 z nich to odniesienia do artykułów przedstawionych jako osiągnięcie habilitacyjne.

W latach 2013 - 2020 Marlena Gryl wykonała ponad 60 recenzji artykułów naukowych przesłanych do czasopism wydawanych przez najważniejsze oficyny wydawnicze (ACS, RSC, Wiley, Elsevier, Springer), co wskazuje, iż jest Ona kompetentnym i przez to poszukiwanym recenzentem.

Habilitantka odbyła jedynie kilka krótkotrwałych staży naukowych (najdłuższy na Uniwersytecie Karola w Pradze), ale wystarczyło to do rozwinięcia intensywnej międzynarodowej współpracy naukowej uwieńczonych wieloma wspólnymi publikacjami.

Szczególnie podkreślić należy sukcesy Marleny Gryl w zdobywaniu subwencji badawczych przeznaczonych dla młodych pracowników naukowych. Była beneficjentką zarówno programu „Sonata” jak i „Sonata bis” Narodowego Centrum Nauki.

Habilitantka ma spore osiągnięcia dydaktyczne. Prowadziła i prowadzi szereg specjalistycznych wykładów i zajęć laboratoryjnych zarówno dla studentów I jak i II stopnia. Opiekowała się trójką dyplomantów na poziomie licencjatu i dwójką magistrantek. Obecnie jest promotorką pomocniczą w dwóch przewodach doktorskich.

Analizując działalność Marleny Gryl można jednoznacznie stwierdzić, iż osiągnęła Ona duży stopień samodzielności naukowej, zarówno w sensie intelektualnym jak i organizacyjnym, co w połączeniu z Jej niezaprzeczalnym dorobkiem badawczym w dziedzinie krystalografii i chemii obliczeniowej sprawia, że rozpoczęcie procedury habilitacyjnej jest w pełni uzasadnione.

### **Opinia o przedstawionym przez Kandydatkę osiągnięciu naukowym**

Jak już wspomniałem, na osiągnięcie habilitacyjne Marleny Gryl, zatytułowane „Inżynieria krystaliczna wydajnych materiałów optycznych z wykorzystaniem metod krystalografii kwantowej oraz metod projektowania *in silico*”, składa się zbiór jedenastu publikacji uzupełniony rozdziałem w specjalistycznej monografii. Zbiór ten z nadmiarem spełnia wymagania habilitacyjne, ale obecność artykułu **H6** zaburza jego spójność. W publikacji tej autorzy przedstawiają zarys opracowanych przez siebie zasad nazewnictwa związków wieloskładnikowych. Jest to ciekawa i pożyteczna publikacja, ale nie przedstawiająca żadnego osiągnięcia naukowego. Nie włączyłbym do zbioru również publikacji o charakterze przeglądowym (**H12**). Artykuły przeglądowe nie są pracami

naukowymi w sensie ścisłym. Habilitanci często włączają takie prace do zbioru publikacji habilitacyjnych, gdyż świadczą one o ich erudycji i kulturze naukowej. Tak rzeczywiście jest, ale tylko w przypadku publikacji samodzielnych. **H12** jest pracą dwuautorską, a pierwszą autorką jest Anna Krawczuk – krytalografka o dorobku naukowym porównywalnym z dorobkiem Marleny Gryl.

Nie mam żadnych zastrzeżeń do pozostałych dziesięciu publikacji, które stanowią tematycznie bardzo spójny zbiór, a opublikowane zostały w czasopismach o dobrej reputacji. Nie mam też najmniejszych wątpliwości, iż Marlena Gryl była pomysłodawcą opisanych w nich badań, a w ich realizacji odgrywała dominującą rolę. Jestem zajadłym przeciwnikiem konieczności zbierania przez habilitantów oświadczeń o współautorstwie, gdyż jest to procedura dla nich upokarzająca i powinna zostać zlikwidowana. Rolę habilitanta w opisanych badaniach można przecież jednoznacznie określić bez takich oświadczeń. Konieczność dostarczania oświadczeń może wzbudzać u habilitantów tendencję do przeszacowania ich własnego udziału w badaniach. Wydaje się, że mogło to mieć miejsce w przypadku artykułów **H1**, **H2** i **H9**. Kandydatka oszacowała swój udział na 70%, a pozostałych sześciu autorów na 30%, czyli średnio 5% na autora. Oznacza to, że albo udział Habilitantki był przeszacowany, albo autorstwo części Jej współpracowników było nieuzasadnione. Zdaję sobie sprawę, iż wpływ głównej autorki na liczbę współautorów może być dosyć ograniczony. Zresztą atrybucja autorstwa artykułów w dziedzinie nauk przyrodniczych jest procesem skomplikowanym i pozostaje przedmiotem rozważań zarówno etyków jak i prawników.

Artykuły przedstawione jako osiągnięcie habilitacyjne sprawiają bardzo dobre wrażenie. Habilitantka wykazuje się biegłością nie tylko w badaniach strukturalnych, ale również w obliczeniach kwantowo-chemicznych. W wyniku współpracy z grupą fizyków czeskich oraz wrocławskich zdobyła też pewne doświadczenie w dziedzinie optyki nieliniowej. Zaskoczenie budzi wybór obiektów badań. Są to, jak pisze Habilitantka, nowe wielofunkcyjne materiały wytworzone z farmaceutyków. Ta wielofunkcyjność jest trochę zagadkowa, bo Kandydatka projektuje i wytwarza materiały wykazujące nieliniowość właściwości optycznych, a inne funkcje pozostają w domyśle. Wydaje się, że materiały NLO wytworzone wyłącznie z farmaceutyków poprzez ich współkryształizację nie mogą być konkurencyjne, co pokazują zresztą publikacje Habilitantki. Natomiast idea ich zastosowania jako jednego ze składników kokryształu, w połączeniu z „klasycznym” syntetycznym chromoforem składającym się z segmentów donorowego i akceptorowego i łącznika  $\pi$ , jest

atrakcyjna i prowadzi do lepszych wyników. Składniki farmakologiczne mogą tworzyć addukty z odpowiednio zaprojektowanym chromoforem NLO poprzez wielokrotne wiązania wodorowe, tak zmieniając konformację tego ostatniego i strukturę nadcząsteczkową adduktu, aby właściwości nieliniowe uległy wzmocnieniu.

Podsumowując, bardzo cenię idee prezentowane przez Habilitantkę zarówno w publikacjach jak i w autoreferacie. Jestem również pełen uznania dla Jej biegłości w krystalografii i chemii obliczeniowej, ale moja starcza ostrożność każe mi wątpić w zastosowanie w elektronice czy optoelektronice projektowanych i wytwarzanych przez Nią materiałów. Nie jest to zresztą żaden zarzut, bowiem każdy uniwersytecki pracownik naukowy powinien mieć swobodę wyboru obiektu badań.

### **Opinia o autoreferacie Habilitantki**

Autoreferat poprawnie oddaje zakres badań przedstawionych jako osiągnięcie habilitacyjne, chociaż miejscami jest mało dydaktyczny. Zaskakuje kolejność omawianych zagadnień (*cicer cum caule?*), rażą zbyt liczne błędy językowe. Jest to niestety zjawisko nagminne wśród współczesnych doktorantów, habilitantów i kandydatów do tytułu profesora.

### **Wniosek**

W moim głębokim przekonaniu oryginalny dorobek naukowy Habilitantki, w tym zbiór publikacji przedstawionych jako osiągnięcie habilitacyjne, oraz Jej działalność dydaktyczna i organizacyjna spełniają wszystkie wymagania ustawy "Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce" (Dz.U. 2020 poz. 85). Wnoszę więc o dopuszczenie dr Marleny Gryl do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego. Równocześnie uważam za celowe zaproszenie Habilitantki na posiedzenie Komisji w celu przedstawienia przez Nią planów przyszłej działalności badawczej i omówienia pewnych tez zawartych w referacie i cyklu artykułów habilitacyjnych. Jako aneks do tej recenzji przedstawiam listę zagadnień, które chciałbym poruszyć podczas spotkania dr Gryl z Komisją.



Adam Proń

## Lista zagadnień, które chciałbym poruszyć podczas rozmowy Komisji z Habilitantką

1. Na czym polega multifunkcjonalność materiałów otrzymanych w wyniku współkryształizacji związków aktywnych farmakologicznie. Właściwości *NLO* i co jeszcze?
2. Pisze Pani, że otrzymywała nowe materiały stosując metody mechanochemiczne. Proszę o szczegóły. Czy metodami tymi można otrzymać duże monokryształy stosowane np. w elektronice?
3. Co oznacza wyrażenie „zmiana motywu taśmy na trimery”? Czy chodzi o przemianę fazową pierwszego rzędu połączoną z trimeryzacją strukturalną?
4. Wykazała Pani, że kokryształ barbitalu i 2-amino-5-nitropirydyny charakteryzuje się 40 razy lepszą wydajnością generowania drugiej harmonicznej in KPD. Czy rzeczywiście jest to „znakomity” wynik? Wydaje się, że badane 40 lat temu przez wielu naukowców proste pochodne *p*-nitroaniliny, np. te opatentowane przez Josepha Zysa, dawały wielokrotnie lepsze wyniki. W autoreferacie Pani zauważyłem szereg nadmiernie wartościujących określeń np. „ogromna dwójłomność”, „pionierskie badania” itd.. Używania takich wyrażen powinno się unikać, szczególnie w tytułach i podtytułach. Teksty naukowe powinny być pisane z sposób mniej emfaticzny.
5. Z opisu eksperymentów w **H9**, a także z innych Pani artykułów, wynika, że wydajność generowania drugiej harmonicznej mierzyła Pani dla próbek proszkowych. Pozostaje dla mnie zagadką dlaczego najpierw pracownice hodowała Pani monokryształy, a potem go męła. Dla wszystkich zastosowań optoelektronicznych, o których Pani wspomina, taka postać materiału jest bezużyteczna. Nie ma przecież „elektroniki proszkowej”.
6. Na str. 14 autoreferatu pisze Pani, że otrzymane materiały wykazują „odpowiednią do zastosowań praktycznych odporność mechaniczną i dopasowanie fazowe”. Jak określano te właściwości i o jakie zastosowania praktyczne chodzi?
7. Artykuł **H3** stanowi teoretyczne wsparcie artykułu **H2**. Czy nie lepiej byłoby opublikować jedną pracę łączącą wyniki przedstawione w **H2** i **H3**? W nauce występuje zjawisko „hiperinflacji publikacyjnej”, obecne również w chemii. Na świecie jest ponad 9000 naukowców, którzy od początku XXI wieku do 2018 r. publikowali częściej niż jeden artykuł co pięć dni, co oznacza średnio ponad 73



artykuły rocznie (źródło: *Nature*, 561, 157 (2018)). Na szczęście na Wydziale Chemii UJ takich „hurtowników” publikacyjnych jeszcze nie ma.

8. Do wytwarzania badanych przez Panią materiałów używa Pani na ogół odczynników handlowych. Chyba tylko w jednym przypadku stosowała Pani związki syntezowane specjalnie w tym celu. Czy zamierza Pani rozszerzyć tę część badań, która wiąże się z syntezą? Jeśli tak, to jakie grupy związków chciałaby Pani badać?

Adam Mani