



**Recenzja osiągnięcia naukowego  
oraz ocena całokształtu aktywności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej  
Pani dr Marleny Gryl  
w związku z postępowaniem w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego**

### Informacje ogólne

Pani dr Marlena Gryl ukończyła studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w 2007 r. Na macierzystym Wydziale wykonywała pod kierunkiem Pani prof. dr hab. Katarzyny Stadnickiej również pracę doktorską zatytułowaną „Crystal Engineering of Materials with Prospective Non-linear Optical Properties”, którą obroniła z wyróżnieniem w 2011 r. Od tego czasu Pani dr Marlena Gryl pracuje w Zakładzie Krystalochemii i Krystalofizyki Wydziału Chemii UJ, najpierw jako asystent, a od 2014 r. jako adiunkt.

### Całokształt aktywności naukowej

Pani dr Marlena Gryl jest autorką 29 artykułów naukowych w czasopismach z listy JCR, w tym 25 po uzyskaniu stopnia naukowego doktora, oraz 1 rozdziału w monografii po doktoracie. Sumaryczny współczynnik wpływu, Impact Factor, z roku publikacji dla wszystkich prac wynosi 103,517. Wartości te pokazują, że Pani Doktor publikuje z umiarkowaną częstotliwością, ale w dobrych czasopismach. Liczba cytowań bez autocytowań dla wszystkich artykułów wynosi ok. 180, a indeks Hirscha 10 (Web of Science), co wskazuje, że prace Habilitantki zostały w pewnym stopniu zauważone w środowisku naukowym. Pani Doktor jest również współautorką międzynarodowego zgłoszenia patentowego.

Habilitantka posiada w dorobku współautorstwo 55 wystąpień na konferencjach krajowych i międzynarodowych, w tym 41 po doktoracie. To duża liczba. Spośród 15 komunikatów ustnych, 10 prezentowała osobiście. Należy dodać, że 5 ustnych wystąpień konferencyjnych odbyło się na zaproszenie, co świadczy m.in. o randze badań prowadzonych przez Panią Doktor.

Pani dr Marlena Gryl napisała ponad 60 recenzji artykułów naukowych dla ok. 10 czasopism o zasięgu międzynarodowym, co wskazuje na docenianie profesjonalizmu Pani Doktor.

Habilitantka jest skuteczną w pozyskiwaniu środków finansowych na swoje badania. Była kierownikiem projektu Sonata 8 NCN (2015-2019) oraz jest kierownikiem projektu Sonata bis 8 NCN (2019-2023). Była/jest wykonawcą w 4 projektach pozauczelnianych: Preludium 15 NCN (2019-2021), Granty na granty: promocja jakości III MNiSW (2018), polsko-belgijskiego projektu w ramach FRS-FNRS (2018-2020) oraz grantu promotorskiego (2009-2011).

Pani dr Marlena Gryl odbyła krótkoterminowe staże w Belgii na Uniwersytecie



INSTITUT FIZYKI I CHEMII

Politechnika Wroclawska  
Wydział Wyspański 27  
50-170 Wroclaw

www.nwr.edu.pl

Namur (wymiana bilateralna, 2018, 2019) i Czechach na Uniwersytecie Karola (Sonata 8 i Sonata bis 8, 2016, 2020). Otrzymała środki finansowe na czteromiesięczny staż na Uniwersytecie Karola w Pradze (program im. Bekkera, NAWA, staż zaplanowany w 2020 roku). Do tego należy dodać, że Pani Doktor prowadzi również współpracę z naukowcami z uniwersytetów w USA, Meksyku, Włoszech, Szwajcarii oraz z Uniwersytetu Rolniczego w Krakowie i Wydziału Fizyki UJ. W ramach tego powstało w sumie ponad 10 publikacji dotyczących optyki nieliniowej i oddziaływań w kryształach. Brak jednak stażu długoterminowego.

***Reasumując: Pani dr Marlena Gryl wykazuje istotną aktywność naukową. Wskazują na to publikacje w dobrych czasopismach z listy JCR, czynny udział w konferencjach naukowych krajowych i międzynarodowych, udział w projektach badawczych jako kierownik i jako wykonawca, recenzowanie wielu artykułów naukowych, a także krótkoterminowe staże i aktywna współpraca z naukowcami z innych uczelni.***

## **Osiągnięcie naukowe**

Osiągnięcie naukowe Pani dr Marleny Gryl pt. „Inżynieria krystaliczna wydajnych materiałów optycznych z wykorzystaniem metod krystalografii kwantowej oraz metod projektowania *in silico*” dotyczy projektowania, otrzymania i charakterystyki głównie dwuskładnikowych kryształów organicznych wykazujących nieliniowe efekty optyczne drugiego rzędu oraz w mniejszym stopniu dwuskładnikowych i jednoskładnikowych kryształów organicznych takich efektów niewykazujących. W projektowanych polarnych kryształach cząsteczką bazową był chromofor NLO, zaś koformerem wpływającym na upakowanie cząsteczek w kryształ, i w ten sposób na właściwości optyczne, była cząsteczka związku aktywnego farmakologicznie (API). Warto dodać, że obecność dwóch komponentów powodowała modyfikację nie tylko właściwości optycznych materiału, ale również farmakologicznych, mechanicznych i innych. Habilitantka korzystając z narzędzi dostępnych w Cambridge Structural Database, służących do tworzenia m.in. map oddziaływań FIM wokół cząsteczek i ich klastrów, zaprojektowała wydajne materiały NLO (projektowanie *in silico*). Badania uzupełniła analizą syntonów oraz powierzchni Hirshfelda i wykresów odcisku palca. Otrzymane poprzez współkryształizację materiały scharakteryzowała za pomocą rentgenowskiej analizy strukturalnej, spektroskopii UV-vis i mikroskopii polaryzacyjnej. Następnie dla wybranych materiałów przeprowadzone zostały obliczenia i pomiary właściwości optycznych (często we współpracy z innymi naukowcami) oraz m.in. analiza topologiczna teoretycznego i eksperymentalnego rozkładu gęstości elektronowej (krystalografia kwantowa). Połączenie zaawansowanych badań krystalograficznych z badaniami optycznymi umożliwiło określenie i zrozumienie relacji pomiędzy strukturą a właściwościami badanych materiałów. W przypadku analizy kryształów niewykazujących nieliniowych efektów optycznych również zastosowane zostały metody krystalografii kwantowej. Wśród wielu badań przeprowadzonych przez Panią Doktor należy szczególnie podkreślić wyznaczanie eksperymentalnego rozkładu gęstości elektronowej w kryształach. Jest to trudna metoda pod względem przygotowania obiektu badań, pomiaru dyfraktometrycznego i udokładnienia multipolowego, ale ostatecznie dostarczająca cennych informacji m.in. na temat oddziaływań w kryształach.

Osiągnięcie naukowe Pani dr Marleny Gryl stanowi 12 prac powiązanych tematycznie: 11 artykułów w czasopismach z listy JCR z lat 2013-2020 i 1 rozdział w monografii z 2018 r. Sumaryczny współczynnik wpływu z roku publikacji wynosi 43,047, co jest bardzo dobrą wartością. Sumaryczna liczba cytowań bez autocytowań wynosi 39 (Web of Science, 5.07.2020). Wydawać by się mogło, że to nie jest dużo, ale należy wziąć pod uwagę, że 8 prac zostało opublikowanych w latach 2018-2020 i trudno oczekiwać już obecnie dużej liczby cytowań. Należy podkreślić, że 2 artykuły cyklu zostały napisane na zaproszenie (H4 i H11), a 4 wyróżnione na okładce czasopism (H4, H5, H7 i H9). Pokazuje to, że Habilitantka i Jej badania cieszą się uznaniem w środowisku naukowym oraz że artykuły przez Nią opublikowane należą do ważnych.

We wszystkich artykułach cyklu Pani dr Marlena Gryl jest autorem korespondującym, a w ośmiu pierwszym autorem. Jeden artykuł jest monoautorski (H4), rozdział w monografii jest

dwuautorski (H12), a pozostałe prace liczą 3 – 10 autorów. Udział własny Habilitantka ocenia na 50 – 100%. Z oświadczeń autorów wynika dominujący wkład Pani dr Marleny Gryl w powstanie tych prac. Habilitantka jest autorką koncepcji badań (w H6 była współautorką), wykonawcą większości badań krystalograficznych, wielu pomiarów właściwości optycznych i niektórych obliczeń teoretycznych. Jej wkład w analizę i interpretację wyników badań jest wyraźnie wiodący. Jest też autorką ostatecznych wersji publikacji.

Praca H1 (*CrystEngComm*, 2013, 15, 3275; IF=3,858) przedstawia nowy materiał o nieliniowych właściwościach optycznych silniejszych niż KDP, mianowicie sól kwasu barbiturowego z lidokainą.

H2 i H3 (*CrystEngComm*, 2014, 16, 5765; IF=4,034 i *J. Phys. Chem. C*, 2015, 119, 590; IF=4,509) prezentują kokryształy barbitalu z melaminą, wykazujące nieliniowy efekt optyczny również silniejszy niż KDP. W H3 Habilitantka przedstawiła analizę topologiczną wyznaczonego przez siebie eksperymentalnego i teoretycznego rozkładu gęstości elektronowej (QTAIM), wzbogaconą o interpretację powierzchni Hirshfelda. W H2 i H3 zaprezentowano m.in. pewne rozwinięcie części badań przeprowadzonych przez Panią Marlenę Gryl w ramach pracy doktorskiej. W Autoreferacie zabrakło jednak informacji na ten temat.

H4 (*Acta Cryst.*, 2015, B71, 392; IF=2,892) dotyczy analizy eksperymentalnego i teoretycznego rozkładu gęstości elektronowej i analizy powierzchni Hirshfelda w połączeniu z pomiarami i obliczeniami właściwości optycznych kryształów soli kwasu barbiturowego z lidokainą, barbitalu z melaminą, kwasu barbiturowego z mocznikiem oraz trisakwabis(barbiturato- $\kappa O^4$ )miedzi(II). Ten ostatni z wymienionych kryształów stanowi przykład obrazujący jak specyficzne ułożenie ligandów w polarnym kryształcie może powodować znikomą wydajność SHG.

H5 (*CrystEngComm*, 2018, 20, 3638; IF=3,382) przedstawia projektowanie dwuskładnikowych polarnych kryształów zawierających m.in. cząsteczki sulfanilamidu oraz wyjaśnia obserwowane właściwości optyczne wykrysztalizowanych materiałów.

H6 (*Acta Cryst.*, 2019, B75, 53; IF=6,732) zapoznaje z prostą i jednoznaczną nomenklaturą stworzoną przez autorów pracy dla wieloskładnikowych materiałów krystalicznych, w tym dla różnego rodzaju kokryształów.

H7 (*IUCrJ*, 2019, 6, 226; IF=4,756) dotyczy projektowania kryształów soli tyraminy i kwasu woliurowego, a także wyjaśnia przyczynę zróżnicowania barwy kryształów w oparciu o topologiczną analizę gęstości elektronowej w ramach QTAIM oraz analizę polaryzowalności atomów i wiązań. Otrzymane kryształy nie były polarne.

H8 (*Acta Cryst.*, 2018, C74, 1586; IF=0,93) przedstawia przede wszystkim analizę wpływu rozpuszczalnika na strukturę kryształów soli tyraminy z barbitem, przeprowadzoną w ramach krystalografii kwantowej. Kryształy analizowane w tej pracy nie były polarne, aczkolwiek zostały otrzymane w związku z badaniami barbituranów pod kątem zastosowań w optyce nieliniowej. H8 w nieco mniejszym stopniu łączy się z pozostałymi artykułami (jednak połączenie takie występuje).

H9 (*Chem. Eur. J.*, 2018, 24, 8727; IF=5,16) to bardzo wartościowa praca. Dotyczy ona kokryształów 2-amino-5-nitropyridyny (chromofor NLO) z barbitem (API), charakteryzujących się wysoką dwójłomnością (2,7 razy wyższą niż dla kalcytu) oraz wysoką wydajnością procesu SHG (40 razy silniejszą niż dla KDP), będącą wynikiem korzystnej orientacji momentów dipolowych trimerów złożonych z jednej cząsteczki API i dwóch cząsteczek chromoforu NLO. W pracy tej Habilitantka dokładnie przedstawiła etapy projektowania materiału krystalicznego oraz analizę wyników badań eksperymentalnych i obliczeń teoretycznych przeprowadzonych dla otrzymanych kryształów. Zaprojektowała i otrzymała kryształy, w których zamiast melaminy (por. H2 i H3) do kryształu wprowadziła 2-amino-5-nitropyridinę mającą wzmocnić właściwości nieliniowo optyczne materiału. Tak jak i we wcześniejszych pracach, wykorzystwała generowanie map oddziaływań FIM wokół cząsteczek i ich klasterów. Stwierdziwszy na podstawie map FIM oraz analizy oddziaływań niekowalencyjnych NCI, że 2-amino-5-nitropyridyna może zastąpić melaminę, z sukcesem

przeprowadziła krystalizację nowego materiału. Otrzymane kryształy cechowały się również zadowalającą odpornością mechaniczną i przezroczystością.

H10 (*Cryst. Growth Des.*, 2019, 19, 6831; IF=4,153) dotyczy kokryształów kwasu cyjanurowego z izoniazidem, charakteryzujących się wysoką dwójłomnością, wysoką wydajnością procesu SHG i potencjałem aplikacyjnym w optoelektronice.

H11 (*J. Phys. Chem. A*, 2020, 124, 2931; IF=2,641) przedstawia analizę sposobu agregacji cząsteczek pochodnej 5,6,10b-triazaacefenantrylenu i wyjaśnia przyczynę nietypowej absorpcji i fluorescencji w kryształach tego związku w oparciu o analizę eksperymentalnego i teoretycznego rozkładu gęstości elektronowej w ramach QAIM, analizę powierzchni Hirshfelda i NCI, w połączeniu z obliczeniami indeksów aromatyczności.

H12 to rozdział w monografii *Multi-Component Crystals: Synthesis, Concepts, Function* (de Gruyter, 2018). Habilitantka jest autorką dwóch podrozdziałów o projektowaniu wieloskładnikowych materiałów krystalicznych za pomocą m.in. map oddziaływań FIM i analizy powierzchni Hirshfelda oraz fragmentów podrozdziału na temat korelacji pomiędzy strukturą a optycznymi właściwościami kryształów. W rozdziale przedstawiła swoje wcześniejsze prace, ale również nowe wyniki obliczeń rozkładu gęstości elektronowej dla kokryształów kwasu p-hydroksybenzoesowego z benzotriazolem.

Pani dr Marlena Gryl zaprojektowała *in silico*, a następnie otrzymała oraz scharakteryzowała m.in. w ramach krystalografii kwantowej kilkanaście wieloskładnikowych materiałów krystalicznych na bazie kwasu barbiturowego i jego pochodnych (H1 – H4, H7, H8, H9), sulfanilamidu (H5), czy też izoniazidu (H10). Część tych materiałów odznaczała się cennymi właściwościami optycznymi. Tu należy szczególnie wyróżnić jedną z odmian polimorficznych 2-amino-5-nitropirydyny i barbitalu, charakteryzującą się niezwykle wysoką wydajnością SHG i silną dwójłomnością. Habilitantka zastosowała metody krystalografii kwantowej również do określenia zależności pomiędzy strukturą a właściwościami fluorescencyjnymi (H11). Ponadto zaproponowała (we współautorstwie) nową nomenklaturę dla wieloskładnikowych materiałów krystalicznych (H6).

***Reasumując: Prace wchodzące w skład osiągnięcia naukowego są powiązane tematycznie. Stanowią one obszerny materiał dotyczący projektowania, otrzymania i zaawansowanej charakterystyki materiałów krystalicznych o interesujących właściwościach optycznych. Badania te nie tylko wnoszą istotny wkład w rozwój krystalografii i fizyki ciała stałego, ale część z nich ma również duży potencjał aplikacyjny w optoelektronice.***

#### **Aktywność dydaktyczna, organizacyjna i popularyzująca naukę**

Pani dr Marlena Gryl jest promotorem pomocniczym w dwóch otwartych przewodach doktorskich. Prowadzi 3 różne wykłady dla studentów, mianowicie z „Właściwości faz krystalicznych”, „Krystalografii i rentgenografii” i „Frontiers in Crystal Engineering”, co nie jest często spotykane na tym etapie kariery zawodowej. Ponadto prowadzi 5 różnych laboratoriów, 2 konwersatoria i pracownię specjalizacyjną, a także prace magisterskie i licencjackie.

Wśród działalności organizacyjnej Pani Doktor należy wymienić prowadzenie sesji naukowej podczas 2nd European Symposium on Chemical Bonding (Hiszpania, 2018), członkostwo w Komitecie organizacyjnym 6th European Charge Density Meeting (Słowacja, 2012), a ponadto aktywny udział w przygotowaniu wniosku dotyczącego zakupu dyfraktometru monokrystalicznego i w przygotowaniu projektów nowych pracowni badawczych dla Zespołu. Wymagało to od Niej sporo pracy i zaangażowania.

Pani dr Marlena Gryl brała udział w promowaniu krystalografii, Zakładu i Wydziału poprzez prowadzenie wykładów popularno-naukowych i prezentację Zakładu Krystalochemii i Krystalofizyki w ramach Nocy Naukowców, jak również prowadzenie wykładu na spotkaniu branżowym zorganizowanym przez Centrum Transferu Technologii CITTRU.

***Reasumując: Pani dr Marlena Gryl wykazuje istotną aktywność dydaktyczną, organizacyjną i popularyzatorską.***

## Wniosek końcowy

Osiągnięcie naukowe Pani dr Marleny Gryl zatytułowane „Inżynieria krystaliczna wydajnych materiałów optycznych z wykorzystaniem metod krystalografii kwantowej oraz metod projektowania *in silico*” to obszerny i wartościowy cykl powiązanych tematycznie prac. Osiągnięcie to wnosi istotny wkład w rozwój krystalografii i fizyki ciała stałego, a niektóre nowe materiały krystaliczne zaprojektowane, otrzymane i następnie scharakteryzowane za pomocą zaawansowanych technik badawczych odznaczają się potencjałem aplikacyjnym w optoelektronice.

Pani dr Marlena Gryl wykazuje istotną aktywność naukową realizowaną na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego oraz we współpracy z jednostkami naukowymi w Polsce i za granicą.

Uważam, że Pani dr Marlena Gryl spełnia wymagania stawiane kandydatom w przewodach habilitacyjnych, zawarte w Ustawie Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 r. (Dz.U. 2018 poz. 1668), w związku z czym popieram nadanie Pani dr Marlenie Gryl stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.

Prof. dr hab. Ilona Turowska-Tyrk