



Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk

Mariana Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań
tel. 61 8695 226, 234, fax 61 8684 524
www.ifmpan.poznan.pl

Prof. dr hab. Jadwiga Tritt-Goc

Poznań, 19 marca 2020 r.

Recenzja pracy habilitacyjnej dr Iwony Olejniczak

**pt. „Spektroskopowe badania stanów podstawowych niskowymiarowych przewodników organicznych: lokalizacja ładunku, nadprzewodnictwo, dwufunkcyjność”
oraz ocena istotnej aktywności naukowej**

Sylwetka naukowa Habilitantki

Pani dr Iwona Olejniczak ukończyła studia wyższe na Wydziale Matematyczno-Fizycznym Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu w 1988 roku uzyskując dyplom magistra fizyki. W latach 1989-1994 była doktorantką Studium Doktoranckiego w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu. Stopień doktora nauk fizycznych uzyskała 24 listopada 1994 roku na podstawie rozprawy doktorskiej pt. „*Sprzężenia elektron-drganie molekularne w kryształach TEA(TCNQ)₂ z nieporządkiem strukturalnym*”. Promotorem rozprawy był prof. dr hab. Andrzej Graja.

Pani dr Iwona Olejniczak swoją pracę zawodową związała z Instytutem Fizyki Molekularnej PAN, w którym pracuje od 1994 roku do chwil obecnej. Od 2018 r. jest zatrudniona na etacie asystenta, poprzednie zatrudnienia dotyczyły stanowisk technicznych. W latach 1995-2006 Habilitantka była zatrudniona na etacie adiunkta.

Ocena osiągnięcia naukowego

Osiągnięcie naukowe dr Iwony Olejniczak, zgodnie z Ustawą określane mianem pracy habilitacyjnej, pt. „*Spektroskopowe badania stanów podstawowych niskowymiarowych przewodników organicznych: lokalizacja ładunku, nadprzewodnictwo, dwufunkcyjność*” stanowi cykl 10 oryginalnych artykułów opublikowanych w latach 1999-2017. Prace ukazały się w bardzo dobrych czasopismach z bazy *Journal Citation Reports* (JCR) takich jak: *Phys.*

Rev. B (4 prace), *Chem. Mater* (2 prace) i po 1 pracy w: *Phys.Chem.Chem.Phys.*, *ChemPhysChem*, *J. Am. Chem. Soc.*, *J. Phys. Chem.* Czasopisma te są reprezentatywne dla tematyki badań Habilitantki. 10 publikacji składających się na osiągnięcie naukowe dr Iwony Olejniczak zostało uporządkowanych w kolejności od [H1] do [H10] i omówionych w Autoreferacie. Wszystkie publikacje są współautorskie i ten fakt nie dziwi w przypadku wykonywania prac doświadczalnych. Świadczy o umiejętności pracy w zespołach badawczych, często międzynarodowych i interdyscyplinarnych. Ta umiejętność jest we współczesnej nauce wysoko ceniona i nawet przedkładana ponad pracę indywidualną. Pewien niedosyt może jednak budzić wkład Habilitantki w powstanie cyklu publikacji, który został przez nią określony na 10% w pracy [H9], 20% w [H2, H3, H5], 30% w [H1, H4], 35% w [H6], 40% w [H7], 50% w [H10] i 60% w [H8]. Z załączonych oświadczeń współautorów artykułów nie wynika jednoznacznie jej wiodący wkład w powstanie cyklu publikacji. Te wątpliwości rozwiewa jednak fakt pełnienia przez Kandydatkę do stopnia doktora habilitowanego roli autora korespondencyjnego w sześciu, na dziesięć publikacji cyklu. Dotyczy to również publikacji, w powstanie których habilitantka oszacowała swój wkład na 20% ([H5]), 30% ([H1]) i 35% ([H6]). Uznaję więc, że został spełniony warunek formalny dotyczący wkładu własnego Habilitantki.

Rozprawa habilitacyjna Pani mgr Iwony Olejniczak dotyczy badań interesującej grupy przewodników organicznych, w których donorem jest płaska molekula bis(etylenoditio)tetratiafulwalenu (w skrócie BEDT-TTF) lub jej pochodne. Badane materiały to sole κ -(BEDT-TTF)₂X, sole BEDT-TTF krystalizujące w fazie β oraz sole chiralne pochodnych tetratiafulwalenu. Tytuł rozprawy „*Spektroskopowe badania stanów podstawowych niskowymiarowych przewodników organicznych: lokalizacja ładunku, nadprzewodnictwo, dwufunkcyjność*” jest bardzo dobrze sformułowany: definiuje badane materiały i bardzo dobrze określa główne cele badań.

Materiały organiczne charakteryzują się silną anizotropią własności fizycznych a ich stan podstawowy zależy od oddziaływań elektron-elektron, elektron-fonon oraz od struktury molekularnej. Z uwagi na interesujące własności tych materiałów np. nadprzewodnictwo, przejście fazowe metal-izolator, przewodnictwo elektryczne, uporządkowanie, mogą one znaleźć zastosowanie w różnych gałęziach przemysłu a także, jako materiały do testowania modeli teoretycznych. Poszukiwane są np. przewodniki organiczne o pożądanых własnościach. Do ich otrzymania potrzebny jest jednak dalszy rozwój wiedzy na temat stanów podstawowych w tych materiałach, np. dokładnie poznanie wpływu wszystkich oddziaływań

biorących udział w przejściach fazowych oraz wpływających na własności fizyczne tych materiałów. Wyniki badań prezentowane w recenzowanej rozprawie habilitacyjnej wnoszą wkład do tej gałęzi wiedzy. Główny celem badań Habilitantki było określenie lokalizacji ładunku oraz parowania elektronów w stanie nadprzewodzącym w wybranych kwazidwuwymiarowych przewodnikach organicznych. Zastosowaną do realizacji tego celu metodą była spektroskopia w podczerwieni oraz spektroskopia Ramana. Widma badano w funkcji temperatury a w przypadku soli κ -(BEDT-TTF)₂X również w funkcji pola magnetycznego.

Prace [H1, H2 i H3] dotyczyły badania widm oscylacyjnych nadprzewodników organicznych typu κ -(BEDT-TTF)₂X, gdzie X= Cu(SCN)₂, Cu[N(CN)₂]Br i Cu[N(CN)₂]Cl w silnych polach magnetycznych. Badania widm oscylacyjnych w podczerwieni potwierdziły zmiany silnych pasm pełnosymetrycznych drgań molekularnych aktywowanych w wyniku sprzężenia elektron-drganie wewnątrz molekularne (Electron - Molecular Vibration, EMV) w stanie nadprzewodzącym i przy przejściu fazowym do stanu normalnego. Wyniki badań nie potwierdziły jednak znaczącej roli tego sprzężenia w przejściu do stanu nadprzewodzącego w solach κ -(BEDT-TTF)₂X. Obserwowane zmiany należy raczej przypisać zmianie struktury elektronowej.

Wyniki przedstawione w pracach [H4, H5, H6 i H7] dotyczyły badania lokalizacji ładunku w solach BEDT-TTF o strukturze β'' -(BEDT-TTF)₂ SF₅RSO₃, gdzie R = CH₂CF₂, CHF₂CF₂, CHF [prace H4, H5], w solach o strukturze β'' -(BEDT-TTF)₂RCH₂SO₃, gdzie R = SF₅, CF₃ [praca H6] oraz w solach β'' -(BEDT-TTF)₄[(H₃O)Fe(C₂O₄)₃]·Y, gdzie Y = C₆H₅Br, (C₆H₅CN)_{0.17}, (C₆H₅Br)_{0.83}, (C₆H₅CN)_{0.4}(C₆H₅F)_{0.6} [praca H7]. Zbadano widma odbiciowe w podczerwieni oraz widma Ramana tych soli. Lokalizacje ładunku w badanych solach powiązano z ich strukturą molekularną. Analiza wyników została uzupełniona obliczeniami struktury pasmowej w oparciu o dane strukturalne oraz analizą wiązań wodorowych, które w solach o strukturze β'' -(BEDT-TTF)₂ SF₅RSO₃ tworzą aniony z końcowymi grupami etylenowymi BEDT-TTF. Wykazano, że widma odbiciowe soli β'' -(BEDT-TTF)₂ SF₅CHF₂CF₂SO₃ znacząco różnią się od pozostałych dwóch soli a lokalizacja ładunku jest wynikiem nieporządku strukturalnego w otoczeniu wiązań wodorowych utworzonych przez aniony soli z końcowymi grupami etylenowymi BEDT-TTF (w tzw. „kieszeni anionowej”). Badania soli o strukturze β'' -(BEDT-TTF)₂RCH₂SO₃ umożliwiły lokalizację ładunków w tych solach oraz wykazały, że dimeryzacja w solach jest możliwa dzięki udziałowi wiązań wodorowych pomiędzy anionami, oraz pomiędzy anionami

a grupami etylenowymi molekuł BEDT-TTF. W solach β'' -(BEDT-TTF)₄[(H₃O)Fe(C₂O₄)₃]·Y wykazano fluktuacje ładunku.

W pracach [H8, H9 i H10] przedstawiono badania stanów podstawowych z lokalizacją ładunku w 2 solach z chiralnymi molekułami donora, należącymi do rodziny pochodnych tetratiafulwalenu. Przeprowadzono spektroskopowe badania w podczerwieni 2 soli i dodatkowo dla 1 soli zbadano również widma Ramana. Głównym celem tych badań było określenie mechanizmów lokalizacji elektronów w niskiej temperaturze.

Reasumując stwierdzam, że wyniki badań przedstawione w rozprawie habilitacyjnej dr Iwony Olejniczak w istotny sposób wzbogaciły naszą wiedzę dotyczącą wybranych przewodników organicznych, w szczególności związku lokalizacji ładunku, stwierdzonego w badaniach własności optycznych soli, z obecnością nieporządku w obrębie wiązań wodorowych, mechanizmu uporządkowania ładunkowego związanego z dimeryzacją indukowaną obecnością wiązań wodorowych pomiędzy warstwami anionową i donorową, efektów związanych z fluktuacjami ładunku oraz stabilizacją stanu mieszanego metal/izolator w nadprzewodnikach organicznych. Na uwagę zasługują również unikatowe badania pasm oscylacyjnych w nadprzewodnikach organicznych κ -(BEDT-TTF)₂X wykonane w silnych polach magnetycznych.

Cykl publikacji składający się na osiągnięcie naukowe zawiera oryginalne wyniki, dotyczy jednorodnego merytorycznie zagadnienia naukowego i tym samym spełnia warunki formalne dotyczące oryginalności i wkładu własnego Habilitantki.

Ocena istotnej aktywności naukowej

Osiągnięć naukowo-badawczych

Przegląd całego dorobku naukowego dr Iwony Olejniczak pozwala stwierdzić, że jest ona specjalistką od badania różnego typu układów molekularnych metodą spektroskopii w podczerwieni i Ramana. Analizę widm Habilitantka wspiera obliczeniami teoretycznymi np. metodą DFT. Zarówno praca doktorska, praca habilitacyjna, jak i pozostałe publikacje są związane z tą tematyką.

Dr Iwona Olejniczak jest, łącznie z pracami wchodzącymi w skład osiągnięcia naukowego, współautorką 59 publikacji naukowych w czasopismach umieszczonych w bazie JCR oraz 5 publikacji w czasopismach spoza tej bazy. 54 prace w czasopismach z bazy JCR zostały opublikowane po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Habilitantka wygłosiła

12 referatów (wszystkie po doktoracie) i prezentowała 20 plakatów (19 po doktoracie) na konferencjach międzynarodowych i krajowych. Była również współautorką 26 referatów i 24 prezentacji plakatowych prezentowanych przez osoby współpracujące. Habilitantka wygłosiła 7 referatów w międzynarodowych ośrodkach naukowych, na Uniwersytetach w USA, Niemczech i Francji.

Sumaryczny impact factor publikacji Habilitantki w czasopismach umieszczonych w bazie JCR wynosi 118,771. Prace te były cytowane 342 razy (bez autocytowań) a indeks Hirscha jest równy 11 (dane wg bazy Web of Science).

Zaangażowanie dr Iwony Olejniczak w pozyskiwanie środków finansowych na badania i współpracę naukową należy ocenić pozytywnie. W latach 1998- 2004 była kierownikiem 3 projektów grantowych. W ramach realizacji tych projektów Kandydatka współpracowała z naukowcami z ośrodków międzynarodowymi w USA, Niemczech i Grecji. Ponadto uczestniczyła w realizacji 9 innych projektów grantowych, głównie finansowanych przez MNiSW.

Podsumowując działalność naukowo-badawczą dr Iwony Olejniczak w latach 1995-2019 stwierdzam, że została ona istotnie powiększona od czasu uzyskania stopnia doktora nauk fizycznych.

Osiągnięć dydaktycznych, popularyzatorskich, organizacyjnych i współpracy międzynarodowej

Pani dr Iwona Olejniczak jest pracownikiem Instytutu PAN, mimo to jej działalność dydaktyczna zasługuje na uwagę. Prowadziła II pracownię studencką, pracownię specjalistyczną, inżynierską i magisterską dla studentów Politechniki Poznańskiej (PP). Sprawowała opiekę naukową nad 1 studentką UAM i 9 studentami (w tym 2 studentkami) PP. Była promotorem pomocniczym w zakończonym w 2015 r. przewodzie doktorskim Arkadiusza Frąckowiaka. Kandydatka ma również osiągnięcia w zakresie popularyzacji nauki: prowadzi liczne demonstracje z fizyki dla dzieci, bierze aktywny udział w Nocy Naukowców a także prowadziła demonstracje interaktywne podczas XXII Poznańskiego Festiwalu Nauki i Sztuki.

Habilitantka odbyła staż podoktorski w latach 1998-1999 na State University of New York at Binghamton w USA oraz 4 krótsze wyjazdy badawcze do Theoretical and Physical Chemistry Institute National Hellenic Research Foundation w Atenach; National High Magnetic Field Laboratory w Tallahassee; do University of Tennessee w Knoxville

i Physikalisches Institut, Universität w Stuttgardzie. Efektem odbytego stażu i wyjazdów badawczych jest współpraca z tymi ośrodkami, która owocuje wspólnymi publikacjami.

Kandydatka od 2008 r. bierze udział w Zespole Ekspertów Zewnętrznych ds. Analiz Delphi Narodowego Programu Foresight Polska 2020. Wykonała również 25 recenzji publikacji w znaczących czasopismach z bazy JRC (6 dla *Phys. Rev. B*, 4 dla *Phys. Rev. Lett.*)

Dr Iwona Olejniczak angażuje się również w działalność organizacyjną. W latach 1994-2017 uczestniczyła w organizacji 8 konferencji międzynarodowych i 1 krajowej pełniąc funkcję kierownika biura konferencyjnego lub sekretarza. Jest członkiem Polskiego Towarzystwa Fizycznego od 2012 r.

Pozytywnie oceniam istotną aktywności naukową dr Iwony Olejniczak, na którą składają się osiągnięcia naukowo-badawcze, dydaktyczne, popularyzatorskie, organizacyjne i dotyczące współpracy międzynarodowej. Świadczą one o dojrzałości naukowej i posiadaniu kwalifikacji Habilitantki do samodzielnej pracy naukowej.

Wniosek

Praca habilitacyjna oraz pozostały dorobek naukowy dr Iwony Olejniczak wskazuje, że jest ona specjalistką w badaniach układów molekularnych, w szczególności niskowymiarowych przewodników organicznych, metodami spektroskopii w podczerwieni i Ramana. Stwierdzam, że cykl 10 publikacji składających się na osiągnięcie naukowe zatytułowany „*Spektroskopowe badania stanów podstawowych niskowymiarowych przewodników organicznych: lokalizacja ładunku, nadprzewodnictwo, dwufunkcyjność*” jest spójny tematycznie, stanowi ważny wkład do uprawianej przez Habilitantkę gałęzi fizyki i spełnia wymagania stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego określone w „Ustawie, z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki” (Dz. U. nr 66, poz. 595 ze zm.) . W związku z tym wnoszę o dopuszczenie dr Iwony Olejniczak do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.