



**INSTYTUT CHEMII
UNI WERSYTET OPOLSKI**

Dr hab. Krzysztof Ejsmont, prof. UO

Opole, 30.04.2026 r.

Katedra Chemii Nieorganicznej i Strukturalnej

Ul. Oleska 48, 45-052 Opole

e-mail: Krzysztof.Ejsmont@uni.opole.pl

RECENZJA

rozprawy doktorskiej Simran Chaudhary

"Porosity and dynamics in crystalline materials of transition metal complexes based on dipodal N-donor ligands and related solid-state phenomena" -

wykonanej pod kierunkiem dr hab. Liliany Dobrzańskiej, prof. UMK oraz dra hab. Zbigniewa Rafińskiego, prof. UMK jako promotora pomocniczego, na Wydziale Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu.

Podstawą formalną wykonania recenzji jest pismo Przewodniczącego Rady Dyscypliny Naukowej - Nauki Chemiczne, dr hab. Urszuli Kiełkowskiej, prof. UMK, z dnia 16 lutego 2026 roku, informujące o powołaniu mnie na recenzenta w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora mgr Simran Chaudhary w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

Recenzowana rozprawa doktorska powstała w oparciu o rezultaty uzyskane w wyniku przeprowadzonych prac badawczych obejmujących: (i) syntezę ligandów zawierających w swej strukturze pierścienie imidazolu (ii) syntezę związków kompleksowych wybranych metali przejściowych ze wspomnianymi wcześniej ligandami; (iii) ustalenie głównych czynników determinujących powstawanie określonych struktur supramolekularnych w badanych kryształach; (iv) badania sorpcji wybranych gazów przez otrzymane kryształy wraz z próbą ustalenia korelacji pomiędzy ich strukturą a właściwościami sorpcyjnymi. Wymienione powyżej prace badawcze

zrealizowano przy zastosowaniu głównie dyfraktometrii rentgenowskiej zarówno monokrystalicznej jak i proszkowej, spektroskopii NMR, analizy termogravimetrycznej oraz obliczeń teoretycznych. Taki dobór materiałów i metod badawczych gwarantuje rzetelną i wnikliwą realizację prac eksperymentalnych postawionych sobie za cel. Należy w tym miejscu zaznaczyć, że obecnie jednym z kluczowych kierunków badań naukowych w szerokokorozumianej chemii strukturalnej i krystalochemii jest projektowanie a następnie otrzymywanie materiałów posiadających i badanie ich właściwości sorpcyjnych. Szczególny nacisk kładzie się na otrzymywanie stabilnych chemicznie materiałów o rozległych powierzchniach oraz dobrze zdefiniowanych porach znajdujących się w ich strukturach krystalicznych. Materiały takie, jak na przykład MOF-y, są wysoce pożądane w zastosowaniach, w których kluczowa jest pojemność magazynowania cząsteczek gości. Z kolei materiały posiadające w strukturze krystalicznej przestrzenie o ograniczonej objętości posiadają znaczny potencjał do zastosowania ich jako materiały do selektywnego rozróżniania cząsteczek gości na podstawie takich czynników jak na przykład rozmiar i specyficzne oddziaływania elektrostatyczne. Badania te szczególnie są ważne z punktu widzenia projektowania i otrzymywania magazynów wodoru, stosowanych w ogniwach paliwowych. W oparciu o zasoby bazy Web of Science słowa kluczowe stanowiące początek tytułu recenzowanej pracy doktorskiej, a mianowicie „Porosity and dynamics in crystalline materials...” występowało w 2025 roku jako słowa kluczowe w ponad 41 artykułach naukowych i należy w tym miejscu dodać, iż jest to czterokrotny wzrost w ciągu ostatnich 10-ciu lat (dane z 27 kwietnia 2026 roku). Można zatem stwierdzić, że wybór tematyki badawczej recenzowanej rozprawy doktorskiej jest w pełni uzasadniony i mieszczący się w głównym nurcie aktualnie uprawianych kierunków badawczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

Recenzowana dysertacja ma układ klasyczny i napisana została w języku angielskim. Składają się na nią trzy główne części: wprowadzenie, część eksperymentalna oraz dyskusja i podsumowanie. Dodatkowo Autorka w pracy zamieściła streszczenie, swój dorobek naukowy, cel i zakres pracy,

wykaz skrótów, cytowaną literaturę, załączniki zawierające widma NMR oraz tabele z parametrami wiązań wodorowych i oddziaływań typu π - π . Całość pracy obejmuje 172 strony i zawiera 113 rysunków i 29 tabel.

W pierwszej części pracy Autorka zamieszcza informacje na temat historii i rozwoju badań określanych mianem inżynierii krystalicznej oraz wskazuje na ich obecne trendy i kierunki badawcze. W kolejnych rozdziałach tej części omawia, między innymi pojęcia związane z oddziaływaniami międzycząsteczkowymi, wiązaniami koordynacyjnymi, przemiany w monokryształach zachowujące jego formę krystaliczną, porowatość struktur krystalicznych i możliwości ich wykorzystania do sorpcji par i gazów, a na koniec tej części omawia cechy strukturalne ligandów zawierających w swej strukturze pierścień imidazolowy. W drugiej części dysertacji Autorka zamieszcza pięć rozdziałów, które obejmują opisy prac eksperymentalnych wykonanych w ramach realizacji celów pracy. Znajdują się w niej między innymi, szczegóły dotyczące przeprowadzonych syntez i krystalizacji, wyznaczania struktur krystalicznych otrzymanych układów (na str. 77 i 92, temperatury pomiarów dla MC1 i MC3 podane są z inną dokładnością niż dla pozostałych struktur), badań adsorpcji par i gazów, oraz obliczeń teoretycznych. W spisie treści podrozdział 8.7 zatytułowany jest: „Gas Adsorption” podczas gdy na stronie 36 pracy, tenże rozdział ma tytuł: „Gas/Vapour Adsorption”. W kolejnej części pracy znajduje się podsumowanie i wnioski wynikające z przeprowadzonych badań naukowych. Na ich podstawie Do najważniejszych osiągnięć naukowych recenzowanej pracy doktorskiej należy zaliczyć:

- (i) przeprowadzenie syntezy, charakterystyki chemicznej i krystalizacji szeregu heterocyklicznych ligandów (zawierających pierścień imidazolu), z czego trzy z nich po raz pierwszy użyto do otrzymywania związków kompleksowych z metalami przejściowymi;
- (ii) ustalenie czynników determinujących tworzenie się określonych struktur krystalicznych otrzymywanych układów;
- (iii) określenie zdolności sorpcyjnych par i gazów wraz z charakterystyką tych procesów przez kryształy otrzymanych związków kompleksowych metali przejściowych;

- (iv) zbadanie zależności pomiędzy strukturą ligandu a właściwościami sorpcyjnymi badanych układów.

Wskazane powyżej osiągnięcia naukowe recenzowanej dysertacji zawierają elementy nowości naukowej w dyscyplinie nauk chemicznych a w szczególności stanowią znaczący wkład w poznaniu cech strukturalnych kompleksów metali przejściowych z ligandami zawierającymi w swej strukturze pierścienie imidazolowe. Uważam dodatkowo, że zawarte w pracy wyniki są inspiracją do prowadzenia dalszych badań zarówno strukturalnych jak i aplikacyjnych tej grupy związków chemicznych.

Poniżej zamieszczam dwie kwestie skierowane do Autorki rozprawy, na które chciałbym uzyskać wyjaśnienia i/lub komentarze podczas publicznej obrony pracy doktorskiej:

- (i) obliczenia energii sieci badanych kryształów wykonywano przy użyciu różnych programów, metod oraz baz funkcyjnych (str. 36), moim zdaniem ujednoczenie sposobu przeprowadzenia tych obliczeń dałoby możliwość lepszego porównania uzyskanych wartości i próby poszukania korelacji z innymi czynnikami, np. strukturalnymi;
- (ii) pomiary sorpcji par i gazów w badanych kryształach wykonywano w temperaturze 25°C (str.36), natomiast struktury krystaliczne wyznaczono w temperaturze 100 K, proponowałbym porównać strukturę kryształów w tych temperaturach.

Dorobek naukowy mgr Simran Chaudhary również zasługuje na uznanie. Składa się na niego sześć artykułów naukowych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym cytowanych czternaście razy, co daje według bazy Scopus (dane z dnia 28.04.2026 r.) indeks $h=3$. Jest współautorką dziewięciu komunikatów ustnych lub plakatowych na konferencjach krajowych i zagranicznych. Zgromadzony przez mgr Simran Chaudhary dorobek naukowy oceniam bardzo wysoko i uważam go za w pełni wystarczający do uzyskania stopnia doktora.

Należy też również zwrócić uwagę na bardzo dobre umiejętności edytorskie Autorki recenzowanej dysertacji, w której doszukałem się jedynie kilku drobnych usterek, które nie umniejszają w istotnym stopniu wartości całej

pracy. Na pochwałę zasługuje również strona graficzna, w szczególności prezentowane na rysunkach, w sposób niezwykle przejrzysty i czytelny, schematy budowy analizowanych struktur krystalicznych.

Podsumowując stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr Simran Chaudhary spełnia warunki określone w Ustawie Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku i wnoszę o dopuszczenie mgr Simran Chaudhary do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Krzysztof Ejmout