

Poznań, 13.08.2026

Dr hab. Anna Lewandowska-Andrałojć, prof. UAM
Zakład Chemii Fizycznej i Fotochemii
Wydział Chemii, UAM
Ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8
Poznań, 61-614
alewand@amu.edu.pl

Recenzja

rozprawy doktorskiej mgr Jakuba Alberta Wagnera
pt. „Nowa klasa zakrzywionych, policyklicznych węglowodorów aromatycznych
opartych na cyklazynie do zastosowań w urządzeniach optoelektronicznych”
Promotor: dr hab. Marcin Lindner, prof. IChO PAN

Podstawą formalną sporządzenia niniejszej recenzji jest pismo Pana prof. dr. hab. Jacka Młynarskiego informujące, że Rada Naukowa IChO PAN na posiedzeniu w dniu 12 czerwca 2026 r. wyznaczyła mnie na recenzenta w postępowaniu w sprawie nadania mgr. Jakubowi Wagnerowi stopnia doktora. Recenzja została opracowana w oparciu o kryteria określone w art. 187 ust. 1-2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, tekst jednolity (Dz.U. z 2024 r. poz. 1571 z późn. zm.).

Recenzowana rozprawa doktorska poświęcona jest projektowaniu, syntezie oraz charakterystyce nowej klasy zakrzywionych, domieszkowanych azotem policyklicznych układów aromatycznych (N-PAHs) przeznaczonych do zastosowań w nowoczesnej optoelektronice organicznej. Autor podjął ambitne i aktualne zagadnienie badawcze, koncentrując się na racjonalnym projektowaniu struktur o nieplanarnej geometrii, pozwalającej ograniczyć niekorzystne oddziaływania π - π typowe dla klasycznych, płaskich układów aromatycznych. Istotnym elementem pracy było określenie zależności pomiędzy budową molekularną otrzymanych związków, ich strukturą elektronową oraz właściwościami fotofizycznymi, ze szczególnym uwzględnieniem emisji TADF i RTP.

Na szczególne podkreślenie zasługuje konsekwentne rozwinięcie koncepcji od układów donor–akceptor (D–A) do struktur donor–akceptor–donor (D–A–D), co pozwoliło uzyskać

bardzo dobre parametry prototypowych urządzeń OLED. Ważnym atutem rozprawy jest także rozszerzenie zastosowania opracowanej platformy molekularnej na materiały transportujące dziury do perowskitowych ogniw słonecznych, w których uzyskano wysokie wartości sprawności konwersji energii.

Podjęta tematyka jest dobrze osadzona w aktualnych kierunkach rozwoju chemii materiałów, fizyki i optoelektroniki organicznej. Przedstawione wyniki mają zarówno istotną wartość poznawczą, jak i wyraźny potencjał aplikacyjny, a systematyczne powiązanie struktury badanych związków z ich właściwościami stanowi jedną z mocniejszych stron rozprawy. Recenzowana rozprawa została zrealizowana w Instytucie Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie pod kierunkiem dr. hab. Marcina Lindnera, prof. IChO PAN. Jednym z istotnych elementów kształcenia doktoranta jest wybór odpowiedniego środowiska naukowego, umożliwiającego rozwój warsztatu badawczego oraz realizację ambitnych zamierzeń naukowych. W tym zakresie Doktorant dokonał bardzo trafnego wyboru, dołączając do zespołu kierowanego przez dr. hab. Marcina Lindnera, który może poszczycić się znaczącymi osiągnięciami w zakresie projektowania i syntezy zaawansowanych, funkcjonalnych związków aromatycznych.

Ogólna charakterystyka rozprawy

Rozprawę doktorską stanowi zbiór trzech powiązanych tematycznie artykułów naukowych, opublikowanych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym: *Angew. Chem. Int. Ed.* (1 praca) i *ACS Appl. Mater. Interfaces* (2 prace) opatrzone rozbudowanym opisem w formie przewodnika. Nie ulega wątpliwości, że zaprezentowany dorobek, opublikowany na łamach renomowanych czasopism naukowych, charakteryzuje się bardzo dobrą jakością pod względem merytorycznym.

Wszystkie przedstawione publikacje mają charakter wieloautorski i interdyscyplinarny, obejmując nie tylko syntezę nowych związków, lecz również ich zaawansowaną charakterystykę fotofizyczną, obliczenia teoretyczne oraz konstrukcję i ocenę prototypowych urządzeń optoelektronicznych. W takim układzie badawczym poszczególne etapy prac wymagały zaangażowania specjalistów reprezentujących różne obszary chemii i nauki o materiałach. Kluczową rolę Doktoranta stanowiło opracowanie i przeprowadzenie syntez badanych związków. Należy podkreślić, że bez uzyskania przez niego odpowiednio zaprojektowanych i syntetycznie wymagających struktur realizacja dalszych badań fotofizycznych, teoretycznych i aplikacyjnych nie byłaby możliwa. Tym samym wkład Doktoranta należy uznać za fundamentalny dla powstania prezentowanych publikacji oraz dla realizacji całej koncepcji badawczej rozprawy.

Część teoretyczna rozprawy stanowi spójną sekwencję rozdziałów, które stopniowo wprowadzają czytelnika w tematykę pracy i dobrze przygotowują do lektury jej zasadniczej

części. Autor rozpoczyna od streszczeń w języku polskim i angielskim, które w mojej ocenie są nieco zbyt zwięzłe i mogłyby szerzej przedstawiać najważniejsze założenia oraz rezultaty pracy. Następnie przedstawia koncepcję prowadzonych badań w formie popularnonaukowej. Fragment ten oceniam bardzo pozytywnie, ponieważ umiejętność przedstawiania złożonych zagadnień naukowych w sposób przystępny, klarowny i zrozumiały jest niezwykle cenna, a Autor bardzo dobrze sobie z tym zadaniem poradził.

Kolejnym elementem rozprawy jest sformułowanie celu pracy oraz hipotezy badawczej. W mojej opinii zostały one określone bardzo precyzyjnie i w sposób logicznie wynikający z aktualnego stanu wiedzy. Punktem wyjścia było zidentyfikowanie istotnych ograniczeń klasycznych, płaskich materiałów organicznych stosowanych w optoelektronice, w szczególności ich skłonności do agregacji typu π - π oraz związanego z tym wygaszania emisji w fazie stałej. Autor zaproponował rozwiązanie tego problemu poprzez celowe wprowadzenie ujemnej krzywizny Gaussa do szkieletu aromatycznego i zaprojektowanie zakrzywionych układów N-PAHs opartych na rdzeniu cykloazyny.

Na tej podstawie sformułowana została spójna koncepcja badawcza, obejmująca zarówno projektowanie i syntezę nowych struktur, jak i analizę zależności pomiędzy ich geometrią, strukturą elektronową i właściwościami fotofizycznymi. Istotnym elementem pracy było również sprawdzenie, czy odpowiednia modyfikacja strukturalna pozwala kontrolować charakter emisji oraz dostosować właściwości otrzymanych materiałów do zastosowań w urządzeniach OLED, a następnie rozszerzyć ich funkcjonalność na materiały transportujące dziury w perowskitowych ogniwach słonecznych. Tak sformułowany cel pracy uważam za ambitny, dobrze uzasadniony i konsekwentnie powiązany z późniejszą częścią eksperymentalną rozprawy.

Odrębny fragment części teoretycznej poświęcono metodologii badań. Autor w sposób zwięzły, ale uporządkowany przedstawił techniki oraz parametry wykorzystywane do potwierdzenia struktury i czystości otrzymanych związków, określenia ich parametrów strukturalnych i geometrycznych, właściwości elektronowych i fotofizycznych, a także oceny parametrów użytkowych urządzeń OLED oraz materiałów HTM w perowskitowych ogniwach słonecznych. Z rozdziału tego wyraźnie wynika duża świadomość Doktoranta dotycząca wielości czynników, które należy uwzględnić przy ocenie rzeczywistego potencjału aplikacyjnego projektowanych materiałów. Autor słusznie podkreśla, że pojedynczy parametr, taki jak wysoka PLQY, mała wartość ΔE_{ST} czy wysoka wydajność konwersji mocy w ogniwach perowskitowych, nie może być traktowany jako samodzielne kryterium jakości materiału.

W tej części rozprawy Doktorant wskazuje również grupy badawcze, z którymi prowadzona była współpraca w zakresie obliczeń kwantowochemicznych oraz charakterystyki fotofizycznej. Pewne zdziwienie budzi natomiast brak analogicznej informacji dotyczącej osób lub zespołów odpowiedzialnych za projektowanie, wykonanie i charakterystykę prototypowych urządzeń OLED oraz PSC.

Część literaturowa prowadzi czytelnika od podstaw strukturalnych PAHs, nanografenów i wpływu defektów nieheksagonalnych oraz domieszkowania azotem, przez zagadnienia związane z inżynierią stanów wzbudzonych i mechanizmami TADF/RTP, aż po zastosowanie materiałów organicznych w OLED i perowskitowych ogniwach słonecznych. Na szczególne podkreślenie zasługuje bardzo dobra orientacja Doktoranta w zagadnieniach syntetycznych oraz dojrzałe rozumienie zależności struktura–właściwości, w tym sposobów świadomego projektowania związków o pożądanych parametrach; jednocześnie, mimo wyraźnie syntetycznego profilu jego ekspertyzy, Autor sprawnie i kompetentnie omawia także zagadnienia dotyczące właściwości stanów wzbudzonych. Jako recenzentka jestem przy tym ciekawa, czy Doktorant posiada również własne doświadczenie eksperymentalne w zakresie charakterystyki fotofizycznej związków organicznych.

Przegląd literatury został przygotowany starannie, zarówno pod względem merytorycznym, jak i graficznym. Autor przywołuje liczne przykłady prac zespołów aktywnie rozwijających badania nad syntezą policyklicznych węglowodorów aromatycznych, emiterami OLED oraz materiałami transportującymi dziury stosowanymi w ogniwach perowskitowych. Bibliografia obejmuje 177 pozycji i jest bardzo aktualna, zawierając wiele publikacji z ostatnich kilku lat. Jednocześnie Autor umiejętnie łączy klasyczne fundamenty dziedziny, takie jak prace związane z odkryciem grafenu, z najnowszymi doniesieniami dotyczącymi emiterów TADF i fotowoltaiki perowskitowej. Potwierdza to zarówno aktualność podjętej problematyki, jak i bardzo dobre osadzenie badań Doktoranta w kontekście współczesnej literatury przedmiotu. W kolejnym punkcie Doktorant omówił wyniki badań własnych, a następnie przedstawił syntetyczne wnioski płynące z uzyskanych wyników.

Rozprawa została przygotowana w sposób bardzo staranny i przejrzysty, zarówno pod względem układu treści, jak i jej strony edytorskiej. Poszczególne części pracy tworzą logiczną i spójną całość, dzięki czemu tok rozumowania Autora oraz najważniejsze wyniki badań są łatwe do śledzenia. Na pozytywną ocenę zasługuje również staranność językowa i redakcyjna pracy, a nieliczne uchybienia stylistyczne i edytorskie nie wpływają na jej odbiór. Można przypuszczać, że do tak wysokiego poziomu redakcyjnego przyczyniło się również deklarowane przez Doktoranta wykorzystanie narzędzi opartych na sztucznej inteligencji, choć oczywiście ostateczna odpowiedzialność za kształt tekstu pozostaje po stronie Autora. Dostrzegłam jedynie drobne uchybienia redakcyjne, które wymieniono poniżej:

- w spisie treści brakuje numerów stron przy dwóch ostatnich rozdziałach;
- w wykazie skrótów nie uwzględniono skrótu HTM;
- na str. 33, w podpisie pod rysunkiem 5, pojawia się określenie „3-etypowe” zamiast „3-etapowe”;
- na str. 37 znajduje się odwołanie do struktury **28**, podczas gdy powinno ono dotyczyć struktury **26**;
- na str. 39 użyto formy „pozostał” zamiast „pozostała”;

- na str. 61 najpierw pojawia się odwołanie do rysunku 27, a dopiero następnie do rysunku 26.

Natomiast w moim odczuciu istotnym ograniczeniem pracy jest jakość części materiału graficznego w załączonych publikacjach. Obniżona rozdzielczość utrudniała w kilku miejscach odczytanie szczegółów i pełną analizę prezentowanych danych.

Ocena merytoryczna pracy

Wyniki przedstawione i omówione w zasadniczej części rozprawy zostały opublikowane w trzech artykułach naukowych, które ukazały się w renomowanych czasopismach chemicznych: jednej pracy w *Angewandte Chemie International Edition* oraz dwóch pracach w *ACS Applied Materials & Interfaces*. Publikacja rezultatów badań w wysoko cenionych czasopismach, stosujących wymagający proces recenzji naukowej, stanowi dodatkowe potwierdzenie wysokiego poziomu merytorycznego oraz wartości naukowej przedstawionych wyników.

Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, że mgr Jakub Wagner jest pierwszym autorem wszystkich trzech publikacji, a jego wkład obejmował m.in. syntezę wszystkich związków stanowiących podstawę opisanych badań. Zasadnicza część rozprawy została podzielona na trzy podrozdziały, z których każdy poświęcono omówieniu najważniejszych wyników przedstawionych w jednej z wymienionych publikacji.

W pierwszej pracy wchodzącej w skład cyklu Autor opracował metodę syntezy zakrzywionych, wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych domieszkowanych azotem, opartych na rdzeniu cyklazynowym. Niewątpliwym osiągnięciem tej pracy jest opracowanie wydajnej i skalowalnej strategii syntetycznej wykorzystującej policykliczny prekursor dikarbonylowy. Znaczenie pracy wykracza jednak poza sam aspekt syntetyczny, ponieważ w ramach przeprowadzonych badań, we współpracy z pozostałymi autorami, przeanalizowano również zależności pomiędzy strukturą chemiczną otrzymanych PAH a ich właściwościami fotofizycznymi istotnymi z punktu widzenia zastosowań w optoelektronice. Ten element pracy zasługuje na szczególne podkreślenie, zwłaszcza że systematyczne badania tego rodzaju zależności są nadal stosunkowo nielicznie reprezentowane w literaturze przedmiotu.

W drugiej pracy wchodzącej w skład cyklu Doktorant rozszerzył koncepcję układów donor–akceptor (D–A), przechodząc do struktur typu donor–akceptor–donor (D–A–D), zawierających dodatkowy zewnętrzny fragment donorowy. Wprowadzenie łańcucha O-alkilowego pozwoliło na zwiększenie rozpuszczalności otrzymanych związków, przy jednoczesnej planaryzacji ich układu cyklicznego. Co istotne, modyfikacja ta nie wpłynęła negatywnie na ich zdolność do emisji typu TADF. Publikacja ta stanowi wartościowy wkład w rozwój materiałów dla optoelektroniki organicznej, ponieważ uzyskane dla badanych emiterów parametry urządzeń OLED należały do najlepszych raportowanych dotychczas dla tej klasy związków.

W trzeciej pracy wchodzącej w skład cyklu Doktorant zaprojektował i zsyntetyzował stabilne termicznie, niedomieszkowane materiały transportujące dziury o architekturze typu T, które następnie z sukcesem zastosowano w perowskitowych ogniwach słonecznych

Na podstawie uzyskanych wyników oraz ich interpretacji można wskazać następujące najważniejsze osiągnięcia pracy doktorskiej:

- 1) Zaprojektowanie i syntezę nowej klasy zakrzywionych, domieszkowanych azotem wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych o charakterystycznej topologii pierścieni 5–7–5. Wynikająca z niej ujemna krzywizna Gaussa ogranicza niekorzystne oddziaływania π – π , a tym samym zmniejsza tendencję do agregacyjnego wygaszania emisji w fazie stałej.
- 2) Wykorzystanie siedmioczłonowego pierścienia azepinowego jako elementu umożliwiającego inżynierię stanów wzbudzonych poprzez ograniczenie nakładania się orbitali granicznych HOMO i LUMO. Podejście to pozwoliło na zmniejszenie różnicy energetycznej pomiędzy stanami singletowym i trypletowym oraz na sterowanie charakterem procesów emisyjnych, obejmujących zarówno termicznie aktywowaną opóźnioną fluorescencję, jak i fosforescencję w temperaturze pokojowej.
- 3) Uzyskanie bardzo wysokich parametrów użytkowych w prototypowych urządzeniach OLED, szczególnie w przypadku emiterów typu D–A–D. Dla najlepszych układów osiągnięto zewnętrzną wydajność kwantową na poziomie 21,9% oraz luminancję przekraczającą 30 100 cd/m², należące do najwyższych wartości raportowanych dla tej klasy materiałów.
- 4) Wykazanie potencjału rdzenia cyklazynowego jako platformy do projektowania niedomieszkowanych materiałów transportujących dziury przeznaczonych do perowskitowych ogniw słonecznych. Opracowane związki o geometrii typu T umożliwiły uzyskanie sprawności konwersji energii na poziomie 20,39%, przewyższającej wartość osiągniętą dla zastosowanego komercyjnego materiału referencyjnego.

W trakcie lektury rozprawy doktorskiej nasunęły mi się następujące pytania, wynikające z ciekawości poznawczej oraz mojej niewiedzy jako Recenzenta, do których proszę, aby Doktorant odniósł się podczas publicznej obrony pracy:

- 1) W przypadku pochodnej **10f** zaobserwowano rzadkie zjawisko inwersji energetycznej najniższych stanów singletowego i trypletowego. Eksperymentalną wartość ΔE_{ST} oszacowano jednak na podstawie położenia maksimów pasm fluorescencji i fosforescencji, a nie onsetów emisji. Proszę Doktoranta o komentarz, na ile wnioski o inwersji stanów S_1 i T_1 jest niezależny od przyjętej metody wyznaczania ich energii. Jakie dodatkowe przesłanki eksperymentalne pozwalają wykluczyć, że obserwowana ujemna wartość ΔE_{ST} jest efektem różnic w relaksacji stanów wzbudzonych, emisji z wyższych stanów lub oddziaływań z matrycą?

- 2) W pracy wykazano, że zmiana matrycy z Zeonexu na CBP potrafi całkowicie zmienić mechanizm luminescencji (np. z TADF na RTP dla związku **10g**). Czy autor mógłby szerzej skomentować, jakie konkretne oddziaływania między cząsteczką gościa a matrycą CBP (np. polarność, sztywność otoczenia) determinują ten proces?
- 3) Jak lokalna antyaromatyczność pierścienia siedmioczłonowego wpływa na trwałość fotochemiczną emiterów w warunkach operacyjnych diody OLED, biorąc pod uwagę, że układy antyaromatyczne są z natury bardziej reaktywne?
- 4) Wiele etapów syntezy, w tym otrzymywanie kluczowego prekursora dikarbonylowego, opierało się na krystalizacji i przemywaniu rozpuszczalnikami zamiast tradycyjnej chromatografii kolumnowej. Biorąc pod uwagę, że czystość materiałów do urządzeń OLED musi typowo przekraczać 99%, w jaki sposób monitorowano obecność śladowych zanieczyszczeń nielotnych i metalicznych?
- 5) Czy w toku prac rozważano wykorzystanie technik fluorescencyjnych do kontroli czystości? W jaki sposób autor wykluczył, że obserwowana luminescencja (szczególnie składowa opóźniona czy inwersja stanów singlet-tryplet) nie pochodzi od śladowych ilości silnie fluorescencyjnych odczynników lub produktów ubocznych, które mogły pozostać w materiale mimo krystalizacji?
- 6) Czy Doktorant mógłby skomentować kwestię skalowalności opracowanych metod syntezy

Powyższe komentarze w żaden sposób nie umniejszają osiągnięć Doktoranta. Nie ulega wątpliwości, że rozprawa została przygotowana przez osobę posiadającą bardzo dobrą i pogłębioną wiedzę w omawianym obszarze badawczym. Dyskusja wyników została przeprowadzona w sposób dojrzały, kompetentny i świadczący o dużej swobodzie w interpretacji uzyskanych rezultatów, co zasługuje na szczególne podkreślenie ze względu na interdyscyplinarny charakter prowadzonych badań. Należy również zaznaczyć, że rozprawa wyróżnia się nie tylko wysokim poziomem merytorycznym, lecz także dużą starannością pod względem językowym, redakcyjnym i edytorskim.

Konkluzja recenzji

Rozprawa doktorska mgr. Jakuba Wagnera stanowi wartościowe i oryginalne opracowanie poświęcone zakrzywionym policyklicznym węglowodorom aromatycznym oraz ich właściwościom istotnym z punktu widzenia zastosowań w optoelektronice. Przedstawione wyniki są dobrym przykładem racjonalnego projektowania struktur molekularnych ukierunkowanego na uzyskanie pożądanych właściwości fotofizycznych i funkcjonalnych. Na szczególne podkreślenie zasługuje umiejętność Doktoranta prowadzenia badań w ramach interdyscyplinarnych zespołów, łączących kompetencje z zakresu syntezy organicznej, charakterystyki fotofizycznej, konstrukcji i oceny prototypowych urządzeń oraz obliczeń

kwantowomechanicznych. Tak szerokie podejście badawcze umożliwiło kompleksową analizę otrzymanych związków i zaowocowało trzema publikacjami w uznanych czasopismach naukowych. Rozprawę oceniam bardzo wysoko, doceniając jej poziom naukowy, zakres i jakość przeprowadzonych badań, a także staranność przygotowania pod względem językowym, redakcyjnym i edytorskim. Stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr. Jakuba Alberta Wagnera pt. **„Nowa klasa zakrzywionych, policyklicznych węglowodorów aromatycznych opartych na cyklazynie do zastosowań w urządzeniach optoelektronicznych”** w pełni spełnia wymagania określone w art. 187 ust. 1-2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (t.j. Dz. U. z 2024 r. poz. 1571) i wnoszę o dopuszczenie Doktoranta do dalszych etapów postępowania doktorskiego.

Biorąc pod uwagę imponujący dorobek naukowy Pana mgr. Jakuba Wagnera, a przede wszystkim wysoką wartość merytoryczną rozprawy doktorskiej, wnoszę do Rady Naukowej Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie o jej wyróżnienie. Na szczególne uznanie zasługuje opracowanie nowatorskiej strategii syntetycznej typu „bottom-up”, która pozwoliła na otrzymanie unikalnej klasy zakrzywionych, N-domieszkowanych wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych o topologii 5-7-5. W ramach przedstawionego cyklu publikacji Doktorant podjął pionierskie badania nad zaawansowaną inżynierią stanów wzbudzonych, wykorzystując antyaromatyczny łącznik azepinowy do precyzyjnego sterowania mechanizmami luminescencji. Uzyskane wyniki, w tym osiągnięcie rekordowych parametrów wydajnościowych w urządzeniach OLED (EQE = 21,9%) i PSC (PCE = 20,39%), mają fundamentalną wartość poznawczą i stanowią istotny wkład w rozwój nowoczesnej optoelektroniki organicznej. Ponadto wyjątkowo bogaty dorobek publikacyjny Doktoranta, obejmujący prestiżowe czasopisma (w tym wyróżnienie „Hot Paper” w Angew. Chem. Int. Ed.), liczne nagrody za najlepsze wystąpienia konferencyjne oraz odbyte staże w czołowych ośrodkach zagranicznych, takich jak Instytut Polimerowy Maxa Plancka czy University of Colorado Boulder, świadczy o jego dużej pracowitości, konsekwencji oraz pełnej dojrzałości naukowej.

Anna Lewandowska-Andrałojć