



prof. dr hab. Miłosz Pawlicki
Zespół Funkcjonalnych Materiałów Organicznych
Zakład Chemii Organicznej, Wydział Chemii
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
tel. +48 12 686 2452
email: pawlicki@chemia.uj.edu.pl
www: <http://mjplab.org/>



Kraków, 10/08/2026

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Jakuba Wagnera zatytułowanej
*Nowa klasa zakrzywionych, policyklicznych węglowodorów aromatycznych
opartych na cyklazynie do zastosowań w urządzeniach optoelektronicznych*

Związki ograniczone nieprzerwanie poszerzają zakres swojej stosowalności w naszym codziennym życiu udowadniając, że precyzyjnie zaplanowana konstrukcja końcowego szkieletu niesie ze sobą kluczowe właściwości, które można adresować w konkretne cele czy to medyczne czy koncentrujące się na współczesnych urządzeniach ważnych dla życia codziennego. Te ostatnie tworzą szeroką grupę pochodnych, których właściwości optyczne odgrywają kluczową rolę w powszechnie stosowanych wyświetlaczach np. w telefonach. Bazowanie na właściwościach optycznych operujących w zakresie światła widzialnego, a takowe jest kluczowe dla ich wykorzystania, wymaga pracy z silnie skoniugowanymi i nienasyconymi związkami organicznymi, których charakter π można relatywnie łatwo i precyzyjnie modulować. W szerokim spektrum modyfikowanych ugrupowań czy szkieletów węglowych intensywnie eksplorowanych w tym kontekście jest szereg homologiczny acenów czy heteroacenów, których liniowa konstrukcja pozwala na efektywną koniugację i znaczące zmiany w obserwowanym zachowaniu optycznym mocno powiązanym z wielkością syntezowanej i analizowanej pochodnej. Szczególne zachowanie w odniesieniu do właściwości optycznych obserwowane jest dla szkieletów, których planarność została zaburzona, a tym samym równomierność oddziaływania p-p uległa zmianie a jego efektywność nie jest taka sama po obu stronach zakrzywionej powierzchni. Wynikiem tego są znacząco odmienne od płaskich pochodnych właściwości zazwyczaj pozwalające na batochromowe przesunięcie absorpcji i emisji obserwowane dla uzyskanych związków. Odształcenia od płaskości wprowadzane są do końcowych struktur poprzez precyzyjne wprowadzenie defektów strukturalnych, np. poprzez izomeryzację i wbudowanie pierścieni pięcio- czy siedmioczłonowych, ale też poprzez wbudowanie w strukturę heteroatomu np. azotu. Dzięki takiej modyfikacji nie tylko otwiera się możliwość niepłaskości, ale także zaburzeniu ulega równomierna dystrybucja gęstości π poprzez obecność atomów bogatych, lub ubogich w elektrony. To umożliwia precyzyjne i kontrolowane tworzenie zamierzonych pochodnych i uzyskanie chromoforu/fluoroforu 'dostrojonego' do konkretnych potrzeb. Właśnie takie modyfikacje i takie podejście stanowią podstawę ocenianej rozprawy doktorskiej i oscylują w centrum zainteresowań badawczych mających na celu opracowanie niepłaskich pochodnych z wbudowanym atomem azotu i zawierających podjednostkę siedmioczłonową wykorzystując motyw azepinowy jako element wbudowujący zarówno





prof. dr hab. Miłosz Pawlicki
Zespół Funkcjonalnych Materiałów Organicznych
Zakład Chemii Organicznej, Wydział Chemii
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
tel. +48 12 686 2452
email: pawlicki@chemia.uj.edu.pl
www: <http://mjplab.org/>



heteroatom, jak i defekt w postaci pierścienia siedmiocłonowego. Pan mgr Jakub Wagner skoncentrował się w swoim podejściu syntetycznym na ściśle zaplanowanych szkieletach bazując na określonych przesłankach, które ostatecznie były konstruowane w oparciu o wykorzystanie dobrze znanych i efektywnych przemianach katalitycznych.

Sama praca realizowana jest zgodnie z zapisami Ustawy Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce z dnia 20 lipca 2018 r., co pozwala na przygotowanie jej w formie krótkiego przewodnika po zestawie opublikowanych już prac badawczych, ale nie zamyka możliwości przygotowania pełnej monografii podsumowującej wszystkie aspekty prowadzonych w ramach doktoratu badań. Osobiście uważam, że rozprawy doktorskie powinny być przygotowywane właśnie w takiej formie ze względu na fakt, że jest to ostatni moment kiedy możliwe jest przygotowanie długiego tekstu podsumowującego aktywność naukową z jakiegoś okresu pracy badawczej, a doktorat jest z całą pewnością wyjątkową cezurą. Taka forma pozwala Doktorantce/Doktorantowi na podzielenie się wszystkim spostrzeżeniami związanymi z realizacją zadań badawczych, a recenzentowi na prześledzenie rozwoju i ewolucji podejścia, które z całą pewnością ulegało zmianom w miarę napotykanym przeszkód. Co jednak istotniejsze pozwala również na zawarcie wyników nieopublikowanych, które wymagają ukończenia, a dzięki temu pozostają ramy do właściwej kontynuacji. To niezwykle istotne w mojej ocenie ze względu na swoistą ciągłość prowadzonych prac badawczych, choć z punktu widzenia Recenzenta najistotniejszym aspektem jest możliwość prześledzenia ewolucji samego Doktoranta i stopniowego osiągnięcia dojrzałości naukowej. W rozpatrywanym przypadku Doktorant zastosował opcję pierwszą, tj. przedstawił krótkie wprowadzenie do swoich wyników i w sposób skondensowany omówił zawartość merytoryczną opublikowanych prac. Tak jak wspomniałem powyżej to nie jest zbrodnia chociaż trudno jest przeprowadzić ekstrakcję poczynionych przez Doktoranta postępów w trakcie realizacji pracy. To jednak syndrom obecnych czasów i uciec od nich niepodobna.

W myśl założeń związanych z formą rozprawy doktorskiej mgr. Wagnera podstawą do jej złożenia są 3 publikacje oryginalne, które ukazały się w latach 2022-2024 w bardzo dobrych czasopiśmie naukowych, tj. *Angew. Chem. Int. Ed.* (1), *ACS Appl. Mater. Inter.* (2). Wszystkie publikacje są wieloautorskie a na liście autorów można znaleźć odpowiednio 6, 8 i 13 współautorów, a udział poszczególnych współautorów został potwierdzony w dołączonych do rozprawy oświadczeniach. Z analizy oświadczeń wynika, że Doktorant był w pełni odpowiedzialny za przeprowadzenie syntez zaplanowanych pochodnych i ich analizę spektroskopową. Nieco mniejszy udział miał Doktorant w kluczowych eksperymentach związanych z analizą właściwości optycznych, ale wierzę że skrupulatnie przeanalizował uzyskane wyniki i śledził rozwój również tej części badań dla swoich pochodnych. Z formalnego więc punktu praca przedstawiona jest w sposób właściwy i może stanowić podstawę do nadania stopnia doktora nauk chemicznych.





Przygotowana do oceny dokumentacja na 86 stronach przedstawia kluczowe dla dyskusji aspekty otwierając je stroną tytułową, za którą pojawiają się podziękowania, informacje o źródłach finansowania, spis treści, listę publikacji wchodzących w skład rozprawy, a także lista pozostałych publikacji w dorobku Doktoranta oraz wykaz staży i udziału w konferencjach. Przed samą dyskusją można znaleźć wykaz używanych skrótów i streszczenia w języku polskim i angielskim. W tekście Autor zawarł również opis popularnooaukowy swoich wyników, a dalej (str. 19) Doktorant rozpoczyna opis merytoryczny powiązany z wynikami własnymi. Na stronie 19 Doktorant definiuje cel, którym było „**zaprojektowanie, synteza oraz szczegółowa charakterystyka nowej klasy zakrzywionych, wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych domieszkowanych azotem (N-PAHs), opartych na rdzeniu cyklazyny**” i w dalszej części projektu zbadanie uzyskanych pochodnych w kierunku obserwacji właściwości optycznych włączając termicznie aktywowaną opóźnioną fluorescencję (TADF), a także możliwości transportowania dziury (*hole-transporting*) przez związki zawierające zaprojektowane i uzyskane przez Doktoranta pochodne domieszkowane azotem. Na stronach 27-58 mgr Wagner przedstawia zagadnienia teoretyczne i stan literatury związany z kluczową dla swoich prac tematyką. Autor w sposób przystępny omawia aspekty strukturalne znanych szkieletów nanografenowych zawierających heteroatom i połączenia ich z oczekiwanymi właściwościami, tj. zjawiskiem TADF czy the RTP (fosforescencja w temperaturze pokojowej). Oba te zjawiska są kluczowe dla np. współcześnie konstruowanych diód o zwiększonej efektywności ze względu na wykorzystanie populacji stanów trypletowych, co zostało również rzeczowo omówione przez Doktoranta w części wstępnej poświęconej teoretycznym podstawom analizowanych zjawisk, a także bardziej praktycznym elementem jakim jest konstrukcja diód. Ta część przedstawiona jest przejrzysto i choć jest stanowczo ograniczona pozwala czytelnikowi na uzyskanie klarownego obrazu obecnego stanu wiedzy kluczowego dla właściwej oceny wyników oryginalnych Doktoranta. Właściwa dyskusja wyników, a w zasadzie ich przedstawienie zawarte jest na stronach 59-72. Dalej jest podsumowanie wyników, wykaz wykorzystanej literatury, kopie prac stanowiących podstawę rozprawy oraz oświadczenia współautorów.

Zarówno fragment teoretyczny, jak i część poświęconą wynikom oryginalnym przeczytałem z dużą ciekawością doceniając plan syntetyczny i jego skuteczną realizację, która została podsumowana w pierwszej publikacji (ANIE 2022). Tam również, dzięki współpracy z ośrodkiem łódzkim opisane są właściwości optyczne, w tym TADF. Także dzięki tej współpracy otrzymane zostały prototypowe diody OLED, a ich sprawność określona. Trudno jest polemizować z wynikami, które zostały skrupulatnie przeanalizowane przez grono recenzentów w czasopiśmie, które szczytą się znaczącą rozpoznawalnością i niezaprzeczalną renomą jednak przyznam, że nie do końca pojmuję argument o występowaniu charakteru paratropowego w obrębie siedmioczłonowego pierścienia azepinowego, który ma mieć wkład





w izolację obu podjednostek diatropowych o czym Doktorant wspomina na str. 59. To przyznam zagadnienia (występowanie lokalnych bądź globalnych efektów diatropowych/paratropowych), które mocno mnie zajmują i po przyjrzeniu się dostępnym danym mam kilka pytań/uwag w tej kwestii. W żadnym miejscu nie znalazłem wartości liczbowych wyciągniętych z analizy teoretycznej a przedstawionej w materiałach dodatkowych do publikacji na stronach 48-51. Analiza IMS pokazała występowanie ujemnej stałej ekranowania na poziomie (o ile dobrze odczytuję poziomice) -5 ppm dla stanu S0 co sugeruje występowanie charakteru paratropowego w zewnętrznym polu magnetycznym. Ta sama analiza dla stanu trypletowego T1 dała wartość zwiększoną do (tutaj wyłącznie postuluję) ok. -2 ppm. To oczywiście w myśl zasady Bairda tworzy spójny obraz jednocześnie znacząco obniżając charakter diatropowy fragmentów otaczających pierścień azepiny. Mam jednak pewne wątpliwości ze względu na samo otoczenie, szczególnie że analiza AICD nie jest jednoznaczna a obecność paratropowości nie jest oczywista. Można się spodziewać, że przy określonej konstrukcji wpływ prądu diatropowego sąsiadujących pierścieni będzie generował w analizie teoretycznej efekt paratropowy w otoczeniu. W związku z tym chciałbym zapytać czy faktycznie wspomniana paratropowość (dość znikoma) jest kluczowa, czy też ważne jest izolowanie oby fragmentów spełniających regułę Hückela, które docelowo umożliwiają obserwację określonego zachowania optycznego? Jak kluczowa dla obserwacji zjawiska TADF jest niepłaskość fragmentu donorowego? Pochodne typu azaacenowego (jak wbudowany motyw chinoksaliny) są powszechnie znane ze stabilizacji stanu trypletowego. I co istotne jak zmieniają się parametry uzyskiwane teoretycznie dla obu stron niepłaskiej powierzchni analizowanych związków? W dwóch pozostałych publikacjach stanowiących podstawę ocenianej rozprawy Doktorant eksploruje zachowanie ukierunkowane na określoną odpowiedź wykorzystując zaprojektowany szkielet odpowiednio go modyfikując modulując tym samym rozpuszczalność i efektywnie tworząc iody OLED (publikacja 2) lub potencjalny transport defektu pozytywnego (hole) udowadniając możliwości wykorzystania zaprojektowanych przez siebie pochodnych. Wszystkie pochodne były otrzymane w sposób efektywny z wykorzystaniem reakcji katalitycznych a ich charakterystyka nie budzi zastrzeżeń. Ponadto wszelkie zawarte procedury są rzetelnie przedstawione i umożliwiają ich odtworzenie.

Podsumowując, przedstawiona do oceny rozprawa doktorska mgr. Jakuba Wagnera to bardzo ciekawy materiał poznawczy, w którym z łatwością można dostrzec systematyczność podejścia do otrzymywania strukturalnie zmienionych heteroacenów i końcowe korelowanie tych modyfikacji z obserwowanymi właściwościami. Wszelkie pytania czy uwagi zawarte w tekście mają charakter plemiczny i nie podważają spójności przedstawionych wyników. Zresztą czytając wszystkie trzy publikacje łatwo można dostrzec istotne współcześnie, holistyczne podejście do analizy uzyskiwanych wyników, które bazuje na szeregu





prof. dr hab. Miłosz Pawlicki
Zespół Funkcjonalnych Materiałów Organicznych
Zakład Chemii Organicznej, Wydział Chemii
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
tel. +48 12 686 2452
email: pawlicki@chemia.uj.edu.pl
www: <http://mjplab.org/>



5

eksperymentów spektroskopowych popartych bardzo szczegółową analizą teoretyczną. Ponadto należy podkreślić, że w prezentowanym materiale widać rozwój pierwotnego pomysłu, który ewoluował i był odpowiednio modyfikowany ostatecznie dając oczekiwaną odpowiedź np. optyczną. To absolutnie kluczowy element w pracy badawczej i stanowi dobry prognostyk na dalszą drogę naukową, która współcześnie zawsze balansuje na pograniczu wielu dziedzin. Dotychczasowy dorobek naukowy Doktoranta potwierdza tę świadomość, gdyż poza 3 publikacjami 'doktoratowymi', mgr Jakub Wagner legitymuje się kolejnymi 4 pozycjami, których tematyka odbiega od głównego nurtu dotychczasowej pracy. Dorobek naukowy Doktoranta to także udział w szeregu konferencji naukowych i staży, a także kierowanie projektem Preludium i aktywną realizację projektów implementowanych w rodzimej grupie badawczej. To tworzy obraz odpowiednio doświadczonego naukowca, który z całą pewnością będzie rozwijał swoje pasje badawcze realizując kolejne złożone tematy z pogranicza różnych dziedzin.

W związku z powyższym stwierdzam, że przedstawiona do oceny rozprawa doktorska spełnia wszelkie wymagania stawiane rozprawom doktorskim w myśl ustawy Prawo o Szkolnictwie Wyższym z dnia 20 lipca 2018 r. i wnoszę do Rady Naukowej IChO PAN o dopuszczenie mgr. Jakuba Wagnera do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Kraków, 10/08/2026

Miłosz Pawlicki

