



Wrocław, 08.08.2026

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

Przedłożona mi do recenzji rozprawa doktorska mgr. Jakuba Alberta Wagnera została przygotowana w Instytucie Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk pod opieką promotorską dr. hab. Marcina Lindnera. Praca ta mieści się w nurcie badań prowadzonych przez Promotora wraz z zespołem nad funkcjonalnymi zakrzywionymi związkami aromatycznymi, nanografenami domieszkowanymi heteroatomami i architekturami typu D-A dla zastosowań TADF OLED.

Na rozprawę doktorską Jakuba Wagnera składa się zbiór trzech powiązanych tematycznie opublikowanych artykułów naukowych, do których Kandydat – zgodnie z wymaganiami – dołączył odniesienie do aktualnego stanu wiedzy (rozdział “Część literaturowa”), opis swoich osiągnięć (rozdział “Badania własne”), a także streszczenia oraz oświadczenia współautorów publikacji. Dodatkowo, do rozprawy dołączony został nietypowy podrozdział, będący krótkim wstępem popularnonaukowym. Próba opowiedzenia o swojej pracy naukowej w sposób zrozumiały dla niechemika jest godna pochwały i szczególnie ważna w czasach kiedy wydziały chemii borykają się z niedoborem studentów.

Publikacje stanowiące podstawę rozprawy zostały opublikowane w doskonałych czasopiśmie, m.in. w prestiżowym *Angewandte Chemie International Edition* (praca 1. z 2022 r.). Co więcej, publikacja ta została uznana za *HOT PAPER* oraz opisana w ‘Synfacts’. Pozostałe dwie prace (z 2023 i 2024) ukazały się w *ACS Applied Materials & Interfaces* o wysokim współczynniku wpływu. We wszystkich trzech publikacjach pan Jakub Wanger jest pierwszym autorem, z tym że w pracy 1. wskazano, że wkład trojga pierwszych autorów jest równy, a w pracy 3. roku – dwójga. Załączone oświadczenia współautorów i samego Kandydata wykazują jednoznacznie, że udział pana Jakuba Wagnera w badaniach był kluczowy i dobrze określony, i polegał na syntezach wszystkich związków będącym obiektem badań w pracach 1.-3., ich analizie metodami NMR, HRMS i IR, otrzymaniu monokryształów do analizy rentgenograficznej oraz opracowaniu i interpretacji danych strukturalnych. Dodatkowo, mgr Jakub Wagner przygotowywał suplement, współtworzył grafiki i uczestniczył w przygotowywaniu tekstu publikacji i odpowiedzi na recenzje. Kandydat przedstawił także swoją aktywność naukową w innych obszarach, którą oceniam wysoko: był on współautorem czterech innych publikacji, kierował grantem Preludium 21, był wykonawcą w grantie Sontata 14 promotora, udzielał się na konferencjach i innych wydarzeniach naukowych, zdobywając dwie nagrody za najlepsze prezentacje ustne, a także odbył trzy staże w różnych grupach



badawczych, trwające w sumie 10 miesięcy (Moguncja (Niemcy), Boulder (USA), St Andrews (GB)).

Część literaturowa rozprawy jest bardzo dobrze napisana, pozwala prześledzić ewolucję struktur i syntez policyklicznych węglowodorów aromatycznych, stanowiących zaawansowane materiały funkcjonalne, od nanografenów przez ich pofałdowane analogi do cząsteczek domieszkowanych azotem lub borem. Autor w przejrzysty sposób opisał zależności między strukturą (tzn. sposobem i stopniem pofałdowania, ułożeniem pierścieni i ich rozmiarem, wielkością sprzężonego układu π , sposobem upakowania cząsteczek w ciele stałym, wreszcie – obecnością heteroatomów) a właściwościami chemicznymi i fotofizycznymi, w tym właściwościami kluczowymi dla technologii OLED. W tej części rozprawy Kandydat powołuje się na 177 pozycji literaturowych, z których większość powstała w ciągu ostatnich 20 lat. Na tej podstawie stwierdzam, że **rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w dyscyplinie nauki chemiczne.**

W części literaturowej pan Jakub Wanger przedstawił liczne argumenty za wyborem do badań własnych motywów opartych na cyklazynach. Za kluczowe dla powodzenia projektu uznał wprowadzenie ujemnej krzywizny Gaussa i wykorzystanie nietypowego układu pierścieni 5-7-5, gdzie pierścień 7-członowy miał posłużyć jako „bariera antyaromatyczna”, a cząsteczka jako całość miała mieć strukturę donor-akceptor D-A a następnie D-A-D. Za cel pracy postawił sobie zaprojektowanie, syntezę i szczegółową charakterystykę fizykochemiczną nowej klasy związków opartych na rdzeniu cyklazyny i przebadanie ich pod kątem wykorzystania w charakterze emiterów w organicznych diodach luminescencyjnych (OLED) i w charakterze niedomieszkowanych materiałów transportujących dziury w organicznych ogniw perowskitowych (PSCs).

Główną wartością pierwszego projektu przedstawionego w rozprawie jest opracowanie łatwo dostępnych syntetycznie, również w większej skali, zakrzywionych i w pełni sprzężonych N-pirolowych wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych (N-PAH), które wykazują bardzo dobre właściwości emisyjne w urządzeniach TADF OLED. Zakrzywienie układu skutecznie zwiększyło separację przestrzenną orbitali HOMO i LUMO, prowadząc do małej różnicy energii singlet-triplet oraz wysokiej wydajności fotoluminescencji, PLQY, sięgającej 86%. Kolejny projekt koncentrował się na dalszym rozbudowaniu cząsteczek poprzez dołączenie drugiej jednostki donorowej do fragmentu akceptorowego opartego na rdzeniu chinoksaliny (D-A-D). Rozwiązane zostały także problemy techniczne związane ze słabą rozpuszczalnością związków poprzez wprowadzenie podstawnika alkoksylowego; poprawiono stabilność termiczną materiałów. Wprowadzone modyfikacje przyniosły znaczącą poprawę parametrów kluczowych z punktu widzenia zastosowań w diodach OLED. Uzyskano bardzo wysokie wartości wydajności fotoluminescencji (PLQY), osiągające imponujących 96% w matrycy CBP, a także dalsze zmniejszenie różnicy energii między stanami singletowym i trypletowym do zaledwie 0,03-0,04 eV. Umożliwiło to wyjątkowo efektywny proces RISC, a emisja zachodziła zgodnie z mechanizmem TADF, szczególnie korzystnym w warunkach



wysokiej luminancji. Zastosowanie opracowanych materiałów w prototypowych urządzeniach OLED przełożyło się na bardzo dobre parametry pracy: zewnętrzna wydajność kwantowa (EQE) wzrosła z około 12% do 21,9%, a jednocześnie uzyskano istotny wzrost jasności w porównaniu ze związkami typu D-A. W ostatniej części badań Autor wyszedł poza zastosowania OLED, wykorzystując wcześniej opracowany, zakrzywiony rdzeń cyklazynowy do konstrukcji niedomieszkowanych materiałów transportujących dziury (HTM) przeznaczonych do ogniw perowskitowych. Dzięki wprowadzeniu dodatkowych podstawników w pozycjach orto części akceptorowej oraz opracowaniu nowej architektury T-kształtnej uzyskano materiały o optymalnie dopasowanych poziomach energetycznych, wysokiej sprawności konwersji mocy, przewyższającej po różnych względach standardowy materiał spiro-OMeTAD, a także znacznie poprawionej stabilności ogniw wynikającej z dużej hydrofobowości warstw N-PAH.

Podsumowując, po zapoznaniu się z całością rozprawy stwierdzam, że **przedmiotem rozprawy doktorskiej jest oryginalne rozwiązanie problemu naukowego**, a kandydat posiada **umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej**.

Jako recenzentka chciałabym zadać kandydatowi dodatkowe pytania: (1) Autor stwierdza, że krzywizna Gaussa cząsteczki 10l jest ujemna, a z drugiej strony ma ona kształt miski. Chciałabym prosić o bardziej szczegółowe przedstawienie tych krzywizn. (2) W pracach 1. i 2. podaje Pan odległości azot-azot sąsiednich cząsteczek cyklazyny i ogólnie stwierdza, że nie występuje stacking. Chciałabym prosić o analizę tego upakowania; czy odległości C-C w innych punktach cząsteczek nie wskazują na możliwość oddziaływania?

Podsumowując, przedstawiona mi do recenzji rozprawa prezentuje bardzo spójny, celowo zaprojektowany, skutecznie zrealizowany i odpowiednio zinterpretowany materiał badawczy i świadczy o wysokich kompetencjach kandydata. Uważam, że praca doktorska mgr. Jakuba Alberta Wagnera spełnia zarówno ustawowe (spełniania przez rozprawę warunków określonych w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. 2024 poz. 1571 z późn. zm.)), jak i zwyczajowe wymogi stawiane rozprawom doktorskim w dyscyplinie nauki chemiczne. W związku z tym wnioskuję do Rady Naukowej Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk wniosek o dopuszczenie mgr. Jakuba Alberta Wagnera do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora.

Jednocześnie, mając na względzie bardzo wysoki poziom naukowy pracy, potwierdzony poprzez pokonanie bardzo wysokich progów czasopism *Angewandte Chemie* i *ACS Applied Materials & Interfaces* wnioskuję do Rady Naukowej IChO PAN o wyróżnienie pracy. Wnosi ona istotny wkład do dyscypliny nauk chemicznych prezentując badania nad nowymi materiałami funkcjonalnymi opartymi o pierścień cyklazyny. Rozwinięta przez Kandydata chemia jest bardzo wymagająca z racji złożoności i wielowymiarowości badań. Także poziom redakcyjny wszystkich publikacji Jakuba Wagnera jest bardzo wysoki. Wyniki uzyskane przez Kandydata są bardzo wartościowe zarówno pod względem poznawczym – określając podstawowe zależności pomiędzy różnymi aspektami struktury a właściwościami



fotofizycznymi i elektronowymi, jak i pod względem potencjału aplikacyjnego w rzeczywistych prototypowych układach, co przetestowano w układach OLED i ogniwach perowskitowych w charakterze materiałów transportujących dziury (HTM)

Ewa Dudziak.