



Lublin, 20.09.2022

RECENZJA

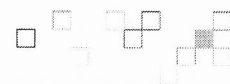
Osiągnięcia habilitacyjnego p.t. „Kontrolowanie procesów chemicznych przez zewnętrzne pola elektryczne: od podstaw do elektroniki molekularnej”, przedstawionego do recenzji przez dr Cinę Foroutan-Nejada, adiunkta w Instytucie Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk

Omówienie sylwetki Habilitanta

Kariera naukowa dr Foroutan-Nejada jest związana z kilkoma ośrodkami naukowymi w różnych państwach. Tytuły licencjata i magistra uzyskał On w dwóch różnych uniwersytetach w Iranie, odpowiednio w 2002 i 2005 roku. W latach 2005-2011 prowadził na Uniwersytecie w Teheranie w ramach studiów doktoranckich badania teoretyczne nad zjawiskiem aromatyczności. W tym samym czasie pracował również jako pracownik dydaktyczny w jednostce macierzystej. Po uzyskaniu stopnia doktora dr Foroutan-Nejad w latach 2012-2014 odbył staż podoktorski na Uniwersytecie Masaryka a w latach 2014-2020 również w tej samej jednostce był zatrudniony jako główny wykonawca lub wykonawca w szeregu projektach badawczych finansowanych z funduszy europejskich bądź Ministerstwa Edukacji Republiki Czeskiej. Od roku 2020 jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w Instytucie Chemii Organicznej PAN.

Na dorobek Habilitanta składa się z imponujących 60 publikacji, z czego 7 publikacji zostało wybranych jako cykl do osiągnięcia habilitacyjnego. Z tej puli 14 publikacji ukazało się przed uzyskaniem przez Kandydata stopnia doktora. Analiza tytułów czasopism pozwala stwierdzić, iż Habilitant koncentruje się na przedstawianiu wyników badań w bardzo rozpoznawalnych tytułach, wliczając *Journal of the American Chemical Society*, *Angewandte Chemie International Edition* czy też *Nature*. Liczba cytowań podana przez Habilitanta wyniosła 167, aczkolwiek wartość ta zawierała autocytowania. Bez nich liczba cytowań wyniosła według bazy danych Scopus 1299, z czego 1110 z nich cytowania z wyłączeniem autocytowań. Kandydat jest też współautorem rozdziału w książce *Effects of Electric Fields on Structure and Reactivity: New Horizons in Chemistry*, wydanej przez Royal Society of Chemistry. Jeżeli chodzi o aktywność konferencyjną, Kandydat zamieścił wyłącznie listę wystąpień ustnych, z czego kilka z prezentacji ustnych było wygłoszonych na zaproszenie. Nie wydaje się, żeby to był kompletny dorobek związany z uczestnictwem w konferencjach.

Imponująco wygląda również kwestia związana z pozyskiwaniem funduszy na badania naukowe w CV Kandydata. Był on beneficjentem programu Marie Curie Fellowship, jak również kierownikiem i wykonawcą w dwóch projektach badawczych finansowanych ze środków Ministerstwa Edukacji Republiki





Czeskiej. W chwili obecnej jest kierownikiem projektu badawczego OPUS, finansowanego w ramach Narodowego Centrum Nauki.

Przedstawione we wniosku dane pozwalają stwierdzić, że Habilitant jest bardzo aktywnym naukowcem, prezentującym wyniki badań w znanych i renomowanych czasopismach naukowych. Dodatkowo, w sposób bardzo efektywny zabiega o finansowanie badań naukowych ze źródeł zewnętrznych. W wykazie osiągnięć zawarta także została informacja o opiece nad doktorantem oraz pełnieniu funkcji promotora dwóch doktorantów, co wskazuje, że Habilitant umie zachęcić młodych adeptów chemii do zainteresowania się swoim obszarem badań.

Omówienie osiągnięcia habilitacyjnego

Przechodząc do omawiania części merytorycznej na początku należy stwierdzić, że cykl publikacji będących podstawą do osiągnięcia naukowego składa się z siedmiu publikacji wydanych w latach 2012-2020. Sumaryczny współczynnik IF wynosi 40,255, a liczba cytowań tych publikacji równa jest 157. Cykl wybranych publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe jest bardzo dobrze odwzorowany w tytule osiągnięcia, który niejako wskazuje na kierunek aktywności naukowej i zainteresowań badawczych Habilitanta.

W pracy oznaczonej jako H1 badane były oddziaływania klastra Al_4^{2-} , wykazującego właściwości aromatyczne, z kationami oraz układami aromatycznymi i wpływem tych oddziaływań na właściwości elektronowe oraz magnetyczne nieorganicznego klastra. Badania pokazały, że oddziaływania pomiędzy benzenem i klastrem są dwójakiego rodzaju, co powoduje tworzenie dwóch kompleksów – w kształcie litery T (oddziaływanie poprzez wiązanie C-H benzenu) i typu π -stacking a różnica w energii tych kompleksów jest minimalna. Dużo ciekawsza była inna obserwacja, która odnosiła się do tego, iż kationy wpływają na sposób tworzenia się kompleksu pomiędzy klastrem a benzenem, poprzez zmianę właściwości elektronowych i magnetycznych klastra. Ekstrapolacja tej obserwacji prowadzi do konkluzji, że zewnętrzne pole elektryczne może takie zmiany również wywoływać, co finalnie mogłoby znaleźć zastosowanie w nanotechnologii.

Problem oddziaływań pomiędzy układem aromatycznym a jonem w obecności zewnętrznego pola elektrycznego ponownie był analizowany w pracy oznaczonej jako H2. W pracy tej zawarte jest kilka istotnych konkluzji, z których najważniejszą jest ta, że obecność zewnętrznego pola elektrycznego wpływa w znaczący sposób na charakterystykę kompleksu układ typu π – jon, co oznacza że w zewnętrznym polu elektrycznym energia kompleksu nie jest równa sumie energii poszczególnych składowych kompleksu. Wpływ zewnętrznego pola elektrycznego może objawiać się poprzez zmianę energii albo mechanizmu oddziaływania w badanych kompleksach, co wbrew pozorom może znaleźć praktyczne zastosowania, jak chociażby wymienione w artykule odsalanie wody.

W publikacji oznaczonej jako H3 przedstawiono wyniki analizy oddziaływań kationów litu z warstwą grafenu umieszczonych w zewnętrznym polu elektrycznym. Powodem tych rozważań była nietypowa zależność, polegająca na obniżeniu energii wiązania w miarę zmniejszania się odległości pomiędzy kationem a grafenem. Według Autorów publikacji, za tym nietypowym wynikiem stoi błąd związany z opisem oddziaływań pomiędzy jonem a grafenem umieszczonymi w zewnętrznym polu elektrycznym.

Praca oznaczona jako H4 poświęcona była analizie zachowania układu złożonego z fulerenu C_{70} i umieszczonej w jego wnętrzu cząsteczki dipolarniej umieszczonego w zewnętrznym polu elektrycznym.



Wybrany fuleren ma budowę elipsoidalną, co pozwala zakładać, że umieszczona w jego wnętrzu prosta cząsteczka typu MX może zajmować dwa różne położenia w minimach energetycznych oraz że możliwe jest przekształcanie się jednego stanu stacjonarnego w inny poprzez odpowiedni stan przejściowy. Pozwala to zakładać, że układy tego typu mogą znaleźć zastosowanie jako przełączniki molekularne.

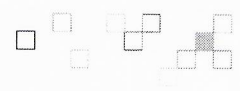
W pracy oznaczonej jako H5, Habilitant przeprowadził dyskusję nad wpływem rozpuszczalnika (wody) na wzajemnie oddziaływanie układów typu jon – układ π -elektronowy umieszczonych w zewnętrznym polu elektrycznym. Wyniki wskazują, że w zależności od siły pola elektrycznego oddziaływania pomiędzy jonem a układem π -elektronowym mogą mieć różną naturę. Niezależnie od tego, do poprawnego opisu oddziaływań konieczne jest uwzględnienie najbliższej klatki solwatacyjnej.

W pracy oznaczonej jako H6 opisane zostały wyniki badań nad wpływem podstawienia w układach π -elektronowych typu koronenów oraz zewnętrznego pola elektrycznego na jego oddziaływanie z jonami. W tym przypadku kluczową obserwacją było stwierdzenie, że do poprawnego opisu oddziaływania pomiędzy jonem a układem typu koronenu konieczne jest wykorzystanie dwóch czynników: pionowego potencjału jonizacji (VIP) oraz pionowego powinowactwa elektronowego (VEA), które w przybliżeniu opisują różnicę energii pomiędzy stanem podstawowym a stanami wzbudzonymi kompleksu (CTES). Wyniki badań nad wpływem zewnętrznego pola elektrycznego na energię wiązania, elektryczne momenty multipolowe oraz względne energie stanów CTES w analizowanych kompleksach sugerują, że oddziaływania elektrostatycznie nie są jedynym czynnikiem opisującym oddziaływania jonów z układami typu koronenowego gdyż należy również uwzględnić proces uwspólniania elektronów.

W ostatniej pracy cyklu, oznaczonej jako H7, przeprowadzona została dyskusja na temat przełączników molekularnych (diod) powstałych na bazie fullerenu oraz soli typu MX, których kontrolowanie może być osiągnięte poprzez zastosowanie kierowanego zewnętrznego pola elektrycznego. Zastosowanie kierowanego pola elektrycznego w tym układzie pozwala na uzyskanie molekularnych memrystorów, urządzeń, w których przewodność w danej chwili zależy od historii prądu elektrycznego płynącego poprzednio. W przypadku badanych kompleksów obecność kierowanego pola elektrycznego może powodować przejście kompleksu z ze stanu jednego minimum lokalnego w drugie poprzez obniżenie lub wyzerowanie energii aktywacji takiego przejścia.

Podsumowanie

Dr Cina Foroutan-Nejad legitymuje się dorobkiem w postaci 60 publikacji naukowych, z czego zdecydowana większość została wydana po uzyskaniu przez Niego stopnia doktora. Przedstawiony do oceny cykl publikacji stanowi zwartą tematycznie całość, w której myśl przewodnią dotyczy wpływu zewnętrznego pola elektrycznego na procesy związane z wzajemnym oddziaływaniem układów π -elektronowych i jonów. Pierwsze artykuły w cyklu poświęcone były podstawowej analizie oddziaływań pomiędzy układami π -elektronowymi a jonami oraz próbą zrozumienia mechanizmu tych oddziaływań, również w obecności rozpuszczalnika. Z kolei w publikacjach z końca cyklu można wyraźnie dostrzec próbę wykorzystania wcześniejszych obserwacji w projektowaniu układów w skali nano, zdolnych do zmiany w sposób skoordynowany i dający się kontrolować swojego stanu pod wpływem zewnętrznego pola elektrycznego. Pomysł badawczy zawarty w cyklu jest bardzo oryginalny i posiadający znaczny potencjał aplikacyjny. Z oświadczeń zarówno Habilitanta jak i współautorów wynika, jest on osobą spinającą niniejsze



osiągnięcie a jego wkład jako osoby projektującej badania i tworzącej problem badawczy jest wiodący. Należy również zaznaczyć, że tematyka badawcza Habilitanta jest bardzo aktualna a zastosowanie zdobytej wiedzy może przełożyć się na powstanie odpowiednich urządzeń wykorzystujących badane zjawisko, po uprzednim pokonaniu wielu problemów natury praktycznej jak chociażby przygotowanie takiego materiału.

Reasumując, wybrany cykl publikacyjny stanowiący podstawę osiągnięcia habilitacyjnego dr Ciny Foroutan-Nejada stanowi oryginalne osiągnięcie Habilitanta. Patrząc równocześnie na dorobek nieuwzględniony w cyklu a zebrany w oddzielnym dokumencie można bez wątpienia stwierdzić, że Habilitant jest od dawna samodzielnym pracownikiem naukowym, posiadającym umiejętność stawiania problemów badawczych, projektowania badań naukowych ale też zdobywania funduszy na badania oraz opieki nad młodymi adeptami. W mojej opinii Habilitant spełnia wszystkie wymogi stawiane osobom ubiegającym się o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego. Gorąco popieram Jego starania do uzyskania tego stopnia.

Dr hab. inż. Marek Stankevič, prof. UMCS