

Dr hab. inż. Mariusz Paweł Mitoraj, prof. UJ
Zakład Chemii Teoretycznej
Uniwersytet Jagielloński
30-387 Kraków, ul.: Gronostajowa 2
email: mitoraj@chemia.uj.edu.pl
TEL (+4812)6862078



JAGIELLONIAN UNIVERSITY
IN KRAKÓW

Recenzja osiągnięcia naukowego „Projektowanie molekularne, synteza oraz właściwości fotofizyczne N,O-koordynowanych kompleksów boru zawierających 1,3-tiazol” oraz pozostałego dorobku naukowo-dydaktycznego i organizacyjnego dr. Mykhayla Potopnyka w sprawie toczącego się postępowania habilitacyjnego.

Informacje ogólne

Dr Mykhaylo Potopnyk pracuje aktualnie jako adiunkt w Instytucie Chemii Organicznej PAN w Warszawie. Habilitant uzyskał stopień doktora z zakresu chemii organicznej w roku 2013 rozprawą z tytułem „Macrocyclic nitrogen-containing receptors with sucrose unit: synthesis and complexing properties” wykonaną pod opieką Prof. Sławomira Jarosza. Magisterium z chemii uzyskał w 2008 roku na Uniwersytecie Lwowskim pracą pt.: “Functionalized 1-arylpiperazines based on diazonium salts as reagents for molecular design of pyrazole containing heterocyclic compounds”. Po doktoracie (od roku 2013) dr Potopnyk opublikował 13 oryginalnych prac naukowych (wliczając prace zgłoszone w cyklu habilitacyjnym); przed doktoratem opublikował dodatkowo 10 prac. Habilitant jest także współautorem pięciu rozdziałów w książkach. Na uwagę zasługuje współudział w patencie (2019 rok) dotyczącym opracowania biocząsteczek w kontekście leczenia białaczki. Całkowity indeks Hirsha kandydata wynosi $h = 10$, a całkowita liczba cytowań to 240. Tematyka badań kandydata koncentruje się wokół szeroko pojętej syntetycznej chemii organicznej, w załączonych pracach cyklu habilitacyjnego można także dostrzec wyniki modelowania molekularnego głównie w oparciu o metody DFT/TDDFT. Całkowity współczynnik oddziaływania wszystkich 34 prac kandydata wynosi $IF \sim 95.2$ (przed uzyskaniem stopnia doktora $IF \sim 18$). Zatem średni IF na jedną pracę to ~ 2.8 . Są to całkowicie akceptowalne parametry naukowometryczne, często spotykane u Habilitantów w Polsce.

Habilitant posiada solidne doświadczenie międzynarodowe: dwa roczne staże podoktorskie (2015/2016–Uniwersytet w Bordeaux/Francja oraz 2013/2014 – Uniwersytet w Michigan, USA) oraz jeden 3 miesięczny pobyt 2019/2020 (Uniwersytet Technologiczny w Kownie, Litwa). Jednakże, niestety, z autoreferatu nie do końca klarowny jest efekt pracy poza granicami Polski ponieważ nie dostrzegłem w wymienionych opublikowanych pracach współautorów z Francji lub/i USA, szkoda, że Habilitant nie opisał także bardzo precyzyjnie jaką dokładnie rolę odegrał w wyżej wymienionych ośrodkach gdzie spędzał staż po doktoracie. Warto w tym momencie dodać, że samo zgłoszone osiągnięcie naukowe – czyli jeden cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopiśmie naukowych jest bardzo dobry i bez wątpienia stanowi znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemicznej. Bardziej szczegółowo osiągnięcie to zostanie omówione w następnym paragrafie.

Ocena osiągnięcia naukowego

Habilitant jako podstawę osiągnięcia naukowego wskazuje pięć prac oryginalnych oraz szóstą przeglądową, które są opublikowane w wiodących chemicznych czasopismach: cztery opublikowane w *ACS/Journal of Organic Chemistry*, jedna w *RSC/Organic Biomolecular Chemistry* oraz szósta monoautorska praca stanowi rozdział monograficzny podsumowujący z książki *RSC/Targets in Heterocyclic Systems*. Sumaryczny współczynnik oddziaływania tych prac jest względnie wysoki $IF \sim 22.5$, na jedną pracę przypada ~ 3.73 . Liczba cytowań tych prac wynosi 31. Szczególnie prace nr 2, 3 zyskały odpowiednio 12 oraz 10 cytowań, praca nr 4 posiada sześć cytowań oraz publikacja nr 5 trzy cytowania – uważam, że są to akceptowalne parametry sejentometryczne zgłoszonego osiągnięcia.

Szczegółowa charakterystyka osiągnięcia jest wg mnie opisana jasno, jednakże zbyt minimalistycznie, zaledwie na 10 stronach. Habilitant zatytułował swoje osiągnięcie jako „Projektowanie molekularne, synteza oraz właściwości fotofizyczne N,O-koordynowanych kompleksów boru zawierających 1,3-tiazol”. Uważam, że zgłoszony cykl jest powiązany tematycznie, tytuł raczej poprawnie oddaje obiekt badań, jednakże umieszczenie na początku wyrazu „Projektowanie” sugeruje nacisk na bardzo dużą istotność wyników modelowania DFT/TDDFT – jednakże, lektura wskazanych w cyklu prac dostarcza konkluzji, że wyniki obliczeń są raczej dodatkiem do interpretacji wyników eksperymentalnych (zrozumienia przejść elektronowych/wertykalnych), a nie stanowią raczej bazy do projektowania lepszych, bardziej trwałych i wydajnych układów emisyjnych. Ponadto, z niewiadomych względów w autoreferacie nie są umieszczone i dyskutowane wyniki DFT/TDDFT – jest to o tyle dziwne, że tytuł rozprawy habilitacyjnej sugeruje bardzo istotną rolę takowych wyników. Jestem bardzo ciekaw dlaczego autor nie zdecydował się opisać w autoreferacie wyników TDDFT, szczególnie, że w opublikowanych pracach są one umieszczone w głównej części manuskryptu.

Praca (1, *J. Org. Chem.* 2018, 83, 1095) dotyczy opracowania syntezy pochodnych 1,3,5,2-oksadiazaboryniny (barwników) połączonych z jednostką tiazolową oraz wyznaczenia ich własności emisyjnych (w różnych roztworach i w stanie stałym); rozważono serię podstawników w pozycji (4). Kompleks oznaczony jako 5a wykazał w stanie stałym bardzo wysoką wydajność kwantową emisji (94%) utożsamioną z brakiem efektywnych oddziaływań π/π , π/Lp (Lp -wolna para elektronowa). Ten sam układ w roztworze THF/H₂O wykazuje intrygujący efekt wzmocnionej fluorescencji poprzez agregację przy wzrastającym stężeniu wody (AIE, Aggregation Induced Emission). Byłoby bardzo wartościowe głębsze zrozumienie tego efektu, np.: poprzez analizę i skomentowanie potencjalnej roli stanów TICT (Twisted Intramolecular Charge Transfer) w kontekście planaryzacji układów w stanie wzbudzonym lub/i efektów PET (Photoinduced Electron Transfer, fotoindukowanego transferu ładunku między donorem i akceptorem). Publikacja (2, *J. Org. Chem.* 2018, 83, 12129) dotyczy opracowania podobnych pochodnych dla różnych donorowo-akceptorowych podstawników R (w pozycji 4), R=H, OMe, F, Cl, CF₃ i scharakteryzowania ich struktury oraz własności fotofizycznych w cieple stałym i roztworach – wszystkie zaproponowane układy okazały się być efektywnymi fotoemiterami w roztworach (niepolarnych) i cieple stałym. W publikacji (3, *J. Org. Chem.* 2019, 84, 5614) zastosowano funkcjonalizację wiązań C-H w tiazolo[3,2-c][1,3,5,2]oksadiazaborynianów w celu podstawienia fragmentu Ar(4-C₆H₄CN) w pierścieniu fenylovym otrzymując szereg aktywnych emisyjnie nowych barwników. Praca (4, *J. Org. Chem.* 2020, 85, 6060) dotyczy opracowania pochodnych tiazolo[3,2-c][1,3,5,2]oksadiazaboryniny z podstawnikiem w pozycji 5 pierścienia 1,3-tiazolowego poprzez postfunkcjonalizację wiązania C-H bez udziału metali przejściowych – pochodna z podstawnikiem SnBu₃ okazała się wykazywać wysoką wydajność kwantową

emisji (44%) w ciele stałym. Lektura tych publikacji prowadzi także do istotnego pytania o stabilność układów w stanie stałym, czy będąc efektywnymi emiterami mogą one zatem stanowić rzeczywisty układ aplikacyjny w optoelektronice ?

Podsumowując, szczegółowa lektura publikacji nr 1-6 oraz ich ogólnego streszczenia w autoreferacie prowadzi do jednoznacznej konkluzji, że uzyskane przez dr. Potopnyka wyniki wnoszą istotne walory w zakresie opracowania nowych strategii syntetycznych w chemii organicznej. Wkład dotyczący chemii obliczeniowej stanowi raczej dodatek natury poznawczej do zrozumienia przejść fotochemicznych w opracowanych barwnikach (w przeciwieństwie do ich raczej kluczowej roli wynikającej z tytułu rozprawy). Pomimo, że wyniki TDDFT stanowią wg mnie dodatkowy element do wiodącej części syntetycznej, to już samo przeprowadzenie takich obliczeń przez Habilitanta należy ocenić bardzo wysoko.

Omówię teraz bardzo krótko wkład dr. Potopnyka w poszczególne prace nr 1-6. Habilitant jest pierwszym oraz korespondencyjnym autorem we wszystkich pracach; swój wkład szacuje od 65% do 100%. Oświadczenia współautorów są spójne z szacunkami Habilitanta i nie ma najmniejszych wątpliwości co do dominującej oraz wiodącej jego roli w powstanie w/w prac zgłoszonych w cyklu habilitacyjnym. Jak już wspomniałem, autoreferat jest napisany dość lakonicznie i nie rozumiem dlaczego nie są w nim umieszczone wyniki modelowania molekularnego TDDFT.

Ocena pozostałego dorobku naukowego, organizacyjnego oraz naukowo-dydaktycznego

Po uzyskaniu stopnia doktora (tj. od roku 2013) Habilitant opublikował 13 prac niewchodzących w skład cyklu habilitacyjnego w czasopiśmie o obiegu międzynarodowym. Tematyka tych prac dotyczy również chemii organicznej. Dodatkowo 5 rozdziałów monograficznych oraz jeden patent – dorobek ten uważam za bardzo solidny.

Kolejnym dowodem świadczącym o dojrzałości naukowej Habilitanta jest uzyskanie finansowania w roli kierownika w grantie NCN „N,O-chelatowane tiazolowe kompleksy boru dla zastosowań optoelektronicznych” (UMO-2019/03/X/ST4/00037)”. Był także wykonawcą w pięciu innych prestiżowych grantach. Habilitant otrzymał także kilka wyróżnień: (1) dwukrotnie (2018, 2019) był laureatem w konkursie „Młodzi Naukowcy Instytutu Chemii Organicznej PAN (2) pierwsza nagroda na Ogólnoukraińskim Konkursie Prac Naukowych Studentów (2008) (3) pierwsza nagroda na X Konferencji Młodych Naukowców i Studentów Chemików Południowej Ukrainy (2007). Ponadto, dr Potopnyk jest promotorem pomocniczym w dwóch pracach doktorskich (Łukasz Szyszka, Karolina Tiara); jest także opiekunem studentów którzy odbywają staże w Instytucie Chemii Organicznej PAN oraz opiekunem młodzieży w ramach warsztatów organizowanych przez Krajowy Fundusz na rzecz Dzieci w Instytucie Chemii Organicznej PAN. Potwierdzeniem rozpoznawalności Habilitanta są także dwa wykłady na zaproszenie oraz sześć wystąpień ustnych na międzynarodowych konferencjach.

Podsumowanie

Podsumowując, uważam, że dr Mykhaylo Potopnyk jest w pełni samodzielnym pracownikiem naukowym, zdolnym do publikowania swoich wyników w bardzo dobrych międzynarodowych czasopismach, potrafiącym zaplanować badania, uzyskiwać na nie środki finansowe oraz je skutecznie realizować. Habilitant był kierownikiem grantu NCN i posiada potencjał zbudowania własnej grupy badawczej. Rozprawa habilitacyjna wnosi bez wątpienia istotny wkład w rozwój syntetycznej chemii organicznej. Z pełnym przekonaniem stwierdzam, że całkowity dorobek naukowy, wyodrębniony cykl publikacji (osiągnięcia naukowe) oraz osiągnięcia dydaktyczno-organizacyjne spełniają wymogi ustawowe. Istotna aktywność naukowa „w więcej niż jednej uczelni” była realizowana w trakcie okresu postdoktorskiego (Bordeaux, Francja; Uniwersytet Michagan, USA) oraz głównie krótkiego stażu w Uniwersytecie Technologicznym w Kownie (Habilitant posiada opublikowane prace w kooperacji z tym ośrodkiem). Zatem, uważam, że przedłożone osiągnięcia oraz cały dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny spełniają wymogi zwyczajowe oraz prawne w rozumieniu aktualnie obowiązującej ustawy o stopniach i tytułach naukowych dotyczące nadania stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne. Zatem wnioskuję do Rady Dyscypliny PAN o nadanie dr. Mykhaylo Potopnykowi stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne. Ponieważ w zgłoszonej dokumentacji nie znalazłem systematycznych i precyzyjnych danych dotyczących punktu 3 Art. 219 [Dz.U.2021.478, Warunki nadania stopnia doktora habilitowanego, „Habilitant powinien także wykazywać się cyt. „istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.”], wnioskuję także o spotkanie z Habilitantem w celu szerszego doprecyzowania swojej aktywności w kontekście w/w wymogu ustawowego.

Mitoraj Mariusz
Mitoraj Mariusz

Dr hab. inż. Mariusz Paweł Mitoraj, prof. UJ, 30.09.2021