



UNIwersytet
Warszawski



Warszawa, dn. 16.09.2022

**Ocena rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego
dr. Ciny Foroutan-Nejada**

Ocena sporządzona jest w związku ze wnioskiem dr. Ciny Foroutan-Nejada z dnia 21 kwietnia 2022r o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne skierowanego do Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk za pośrednictwem Rady Doskonałości Naukowej oraz uchwałą Rady Naukowej Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk nr 220RN/17/2022 z dnia 21 lipca 2022r zawierającą informację o powołaniu mnie na recenzenta. Na dokumentację składa się wniosek z dnia 21 kwietnia 2022r o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego, skan dyplomu doktora nauk chemicznych wraz zaświadczeniem 1/2001 z dnia 1 marca 2021r o uznaniu stopnia nadanego przez University of Teheran jako równoważnego polskiemu stopniowi doktora nauk w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne na podstawie uchwały Rady Naukowej Instytutu Chemii Organicznej nr 214RN/05z dnia 26 lutego 2021r, autoreferat przedstawiający wskazanie osiągnięć naukowych, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce, omówienie osiągniętych wyników prac stanowiących jego podstawę (zawierający również dane personalne, wykaz posiadanych dyplomów oraz informację o dotychczasowym przebiegu zatrudnienia), ich wykaz wraz z określeniem zakresu wykonanych prac a także omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych w języku polskim oraz angielskim. Przedstawiony został również wykaz pozostałych opublikowanych prac naukowych, dane bibliometryczne, informacje o uzyskanych grantach naukowych oraz nagrodach i stypendiach, wykaz wykładów na zaproszenie i wystąpień konferencyjnych, informacja o osiągnięciach dydaktycznych i popularyzacji nauki jak również aktywności naukowej realizowanej w innych jednostkach naukowych, kopie 7 publikacji wchodzących w skład monotematycznego cyklu prac stanowiącego podstawę do wszczęcia procedury habilitacyjnej i oświadczenia autorów publikacji wchodzących w monotematyczny cykl będący podstawą do wszczęcia procedury.

Prof. dr hab. Michał K. Cyrański
Pasteura 1
02-093 Warszawa
e-mail: mkc@chem.uw.edu.pl
Tel: 22 55 26 360

Dane formalne

Pan dr Cina Foroutan-Nejad ukończył studia wyższe w 2005 roku na University of Tehran (Iran) wykonując pracę magisterską pod kierunkiem prof. Parviza Rashidi-Ranjbara i dr. Ebrahima Kianmehra pt. *Ring expansion reaction of 9,9-dichloro-9,9a-dihydrocyclopropa[*e*]pyrene: a mechanistic study*. W tej samej jednostce w 2011r wykonał on pracę doktorską pt. *Magnetic aromaticity: from NICS to bond magnetizability*. Promotorami tej rozprawy byli prof. Parviz Rashidi-Ranjbar oraz dr Shant Shahbazian. W latach 2008-2012 był zatrudniony w School of Chemistry, College of Science, University of Tehran w charakterze wykładowcy. W tym okresie uzyskał on również status Visiting Researcher w Shahid Beheshti University w Teheranie (2011-2012). Następnie odbył on 2-letni staż podoktorski w National Centre for Biomolecular Research, na Uniwersytecie Masaryka w Brnie, Republika Czeska (2012-2014). W tym okresie w 2013r i 2014r odbył on również dwa krótkoterminowe staże w The Arctic University of Norway, Tromsø (Norwegia) a także trzymiesięczny staż w Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Academy of Sciences, w Pradze (Republika Czeska). W latach 2014-2020r był zatrudniony na Uniwersytecie Masaryka w Brnie na stanowisku samodzielnego kierownika badań – początkowo w Central European Institute of Technology (2014-2019) a później w Department of Chemistry oraz National Centre for Biomolecular Research (2020). Od grudnia 2020r jest zatrudniony w Instytucie Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk na etacie adiunkta. Kieruje własną grupą badawczą.

Rozprawa habilitacyjna dr. Ciny Foroutan-Nejada poświęcona jest podstawowym zagadnieniom dotyczącym charakterystyki wiązań chemicznych, właściwości cząsteczek π -elektronowych, kontrolowania procesów chemicznych pod wpływem zewnętrznego pola elektrycznego. Badania te ukierunkowane są na projektowanie układów mających potencjalne zastosowania w elektronice molekularnej. W mojej ocenie to perspektywiczna i interesująca tematyka badawcza.

Ocena dorobku naukowego

Pan dr Cina Foroutan-Nejad opublikował łącznie 60 prac naukowych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym z określonym współczynnikiem oddziaływania (IF), oraz jednego rozdziału w monografii naukowej. Większość z nich stanowi publikacje wieloautorskie - w zdecydowanej większości są to prace dwu- (8 prac) trzy- (19 prac) i czteroautorskie (14 prac). Na uznanie zasługuje iż w 6 pracach jest on jedynym autorem. Zdecydowana większość prac (50) ukazała się po uzyskaniu stopnia doktora, co uważam za wynik znakomity. Również pisma, w których ukazały się prace należą do dobrych/bardzo dobrych periodyków naukowych. Spośród najlepszych należy wymienić: *Nature*, *Nature Communications* (3 prace) *Angewandte Chemie International Edition* (2 prace), *Journal of the American Chemical Society*, *Journal of Chemical Theory and Computation* (3 prace)

czy *Chemistry a European Journal* (5 prac). Sumaryczny *Impact Factor* opublikowanych prac wynosi 321.8 (297.6 po uzyskaniu stopnia doktora), co stanowi średnio ok. 5.5 na pracę. Jest to wynik bardzo dobry. Na podkreślenie zasługuje fakt, iż w zdecydowanej większości prac jest on autorem korespondencyjnym (41 prac, zgodnie z danymi przedstawionymi w dokumencie „Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny”, według moich obliczeń jest ich nawet więcej), oraz znajduje się bardzo wysoko na liście autorów (w 39 pracach na pierwszej lub ostatniej pozycji), co świadczy o tym, iż jego wkład jest dominujący. Prace Pana dr Ciny Foroutan-Nejada były cytowane łącznie 1322 razy (1130 bez autocytowań), zaś indeks Hirscha wynosi $H=21$, wg WoS. Dodać należy, iż Habilitant posiada aż 7 prac, które są cytowane ponad 50 razy każda, przy czym najlepiej jego cytowana praca (*Chem. Eur. J.* 2014, 20, 10140) ma 156 cytowań. Są to znakomite dane, wskazujące z jednej strony na znaczący wpływ prac Habilitanta na rozwój nauki, z drugiej zaś na jego bardzo dużą aktywność oraz dobrze określone/zaplanowane etapy ścieżki rozwoju naukowego. Dopelnieniem są wykłady i komunikaty na konferencjach międzynarodowych, również innych ośrodkach badawczych. Jest ich 12, z czego połowa stanowi wykłady na zaproszenie. Wszystkie one zostały przedstawione po uzyskaniu przez niego stopnia doktora. Dużą aktywność Habilitant wykazywał na polu związanym ze zdobywaniem funduszy na badania naukowe w ramach otwartych konkursów. Jest on obecnie kierownikiem grantu NCN OPUS (2021-2024), zaś w przeszłości był m.in. (współ)aplikującym o granty Ministerstwa Edukacji Republiki Czeskiej (2017-2020, 2018-2019 i 2020-2023) i ich wykonawcą. W latach 2014-2017 był również beneficjentem Marie Curie Fellowship (2014-2017). Za działalność naukową został on wyróżniony honorowym członkostwem Royal Society of Chemistry za wkład do chemii fizycznej, jako młody naukowiec (2012-2014). Pan dr Cina Foroutan-Nejad ma bardzo dobrze rozwiniętą współpracę międzynarodową współpracuje m.in. z prof. prof. Abhikiem Ghoshem i Kennethem Ruudem (The Arctic University of Norway University of Tromsø, Tromsø, Norwegia), Miquelem Solà (University of Girona, Girona, Hiszpania), Michalem Straką (IOCB, Prague, Republika Czeska), Diego Andradą (Saarland University, RFN), Sasonem Shaikiem (Hebrew University of Jerusalem, Jerusalem, Izrael) czy prof. Gernotem Frenkingiem (Philipps-Universität Marburg, Marburg, RFN). Kończąc tę część oceny rozprawy warto zauważyć, że Habilitant był proszony o zrecenzowanie prac naukowych nadsyłanych do Edytorów ważnych czasopism z jego dyscypliny – m.in. *Journal of the American Chemical Society*, *Angewandte Chemie International Edition*, *Nature Communications*, *Inorganic Chemistry*, *Chemistry - A European Journal*, *ACS Applied Nano Materials*, *The Journal of Organic Chemistry*, *Journal of Materials Chemistry C* czy *Scientific Reports*. Łącznie wykonanych recenzji było ok. 300. Za tę aktywność został wyróżniony jako *Top Reviewer in Chemistry* latach 2016-2018 Wskazuje to na uznanie jego kompetencji przez naukowe instytucje zewnętrzne. **W podsumowaniu tej części stwierdzam, iż zarówno całkowity dorobek publikacyjny Habilitanta jak i związana z nim aktywność naukowa jest na znakomitym poziomie.**

Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej

Tytuł osiągnięcia naukowego brzmi: „Kontrolowanie Procesów Chemicznych przez Zewnętrzne Pola Elektryczne: od Podstaw do Elektroniki Molekularnej”. Na rozprawę składa się cykl 7 monotematycznych publikacji naukowych opublikowanych w latach 2012-2019. Są to prace oryginalne, opublikowane w dobrych/bardzo dobrych czasopismach naukowych – cztery prace w *Physical Chemistry Chemical Physics* (**H1**, **H2**, **H4**, **H5**, IF=3.7), po jednej pracy *Journal of Physical Chemistry C* (**H3**, IF=4.1), *Journal of Chemical Theory and Computation* (**H6**, IF=6.0) oraz *Journal of the American Chemical Society* (**H7**, IF=15.4). Jedna z prac (**H1**) jest monoautorska, pozostałe są wieloautorskie a liczba współautorów waha się w granicach 2-4 (oszacowany wkład Habilitanta wynosi 75-40%). Współautorzy złożyli oświadczenia, które są spójne z oszacowanym wkładem dr. Cina Foroutan-Nejada i opisem zakresu jego prac. We wszystkich pracach Habilitant jest autorem korespondencyjnym (w pracach **H2**, **H3**, **H4** i **H7** jest jednym z dwóch autorów korespondencyjnych); w czterech z nich jest na pierwszej pozycji, w jednej na ostatniej. Praca **H1** poświęcona jest kompleksom pomiędzy Al_4^{2-} z benzenem i w obecności kationów metali alkalicznych: litu, sodu, potasu, magnezu i wapnia. Jej celem było przeanalizowanie zależności efektywności delokalizacji elektronowej, analizowanej w oparciu o magnetyzowalność i parametry elektronowe (w oparciu o QTAIM) także (choć w mniejszym stopniu) kryterium geometryczne, w zależności od różnej architektury tworzonych kompleksów (T-shape vs. π - π stacking, architektura sandwichowa) a także czynników, które mają na nią wpływ w kontekście energii oddziaływań, stabilności układu itp. Fundamentalny z tego punktu widzenia jest wpływ kationów, które determinując konformację układu. W podsumowaniu tej pracy przedstawione są dalsze perspektywy badań w kontekście zastosowań w elektronice w postaci przełączników w obecności pola elektrycznego. Uważam że jest to bardzo interesująca i wartościowa praca, zawierająca oprócz głównej myśli przewodniej szereg ważnych zależności strukturalnych i elektronowych. Praca **H2** poświęcona jest efektywności wpływu zewnętrznego pola elektrycznego na energię oddziaływania (wiązania) w kompleksach modelowych układów aromatycznych: benzenu i koronenu z trzema anionami halogenkowymi (fluorek, chlorek i bromek). Jej główną wartością jest krytyczna analiza wyznaczenia energii oddziaływania oraz poprawna jej ocena, wynikająca z analizy kształtu powierzchni energii potencjalnej. Metodologia przedstawiona w tej pracy zastosowana została również dla analizy oddziaływań z kationami. Praca **H3** to polemika z wynikami opublikowanymi w pracy B. Peles-Lemli et al. pt. *Some Unexpected Behavior of the Adsorption of Alkali Metal Ions onto the Graphene Surface under the Effect of External Electric Field* (*J. Phys. Chem. C* **2013**, *117* (41), 21509). Habilitant wykazał niepoprawność zastosowanego podejścia i wynikające z niego zaskakujące wnioski. Istotnym wnioskiem wynikającym z badań habilitanta było stwierdzenie, iż zewnętrzne pole elektryczne wpływa znacząco na charakter wiązania jon - π , co jest szczególnie istotne w przypadku dla dużych polaryzowalnych układów, zaś efekt jest większy dla układów kationowych niż dla anionowych. Wykazał również iż pole zwiększa siłę

oddziaływania pomiędzy jonem a układem π -elektronowym, poprzez zwiększenie stopnia kowalencyjności wiązania. Praca **H4** przedstawia zaprojektowanie bardzo ciekawego układu, który potencjalnie mógłby być otrzymany na drodze syntetycznej (pochodna C_{70} z enkapsulowanymi LiCl, NaF, NaCl) charakteryzującego się dwoma stanami elektronowymi o zbliżonej energii. Wynikają one z orientacji molekuly gościa wewnątrz fullereu. W układzie tym zewnętrzne pole elektryczne mogłoby umożliwić przejście z jednego stanu do drugiego, co umożliwiłoby zastosowania w procesie przechowywania informacji. Rozwinięcie tego pomysłu dla zaprojektowania przełączalnych diod molekularnych było przedmiotem pracy **H7**. To publikacja, która jest zarówno ważna z metodologicznego jak i koncepcyjnego punktu widzenia. W mojej ocenie może mieć przełożenie w mikroelektronice – m.in. w kierunku projektowania memrystorów. Również pozostałe prace **H5** i **H6** podejmują ważne zagadnienia natury badań podstawowych, dotyczące wpływu pola elektrycznego na modelowe układy zawierające rozpuszczalnik (**H5**) oraz na zmianę takich parametrów jak momenty multipolowe, polaryzowalność układu π -elektronowego, energie wiązania czy efektywność przeniesienia ładunku w stanie wzbudzonym (**H6**). Badania te dają wkład w zrozumienie natury wiązań chemicznych, wskazując na czynniki decydujące o efektywności tworzenia kompleksów π -elektronowych układów policyklicznych z jonami. Cechą charakterystyczną przedstawionych prac jest, oprócz badań podstawowych, nakreślenie również daleko idących perspektyw badawczych w kierunku potencjalnych zastosowań.

Nie mam wątpliwości, iż problemy podjęte przez dr. Cina Foroutan-Nejada są ważne z poznawczego punktu widzenia; zawierają również perspektywy aplikacyjne dla projektowania układów mających zastosowanie w elektronice molekularnej. Przedstawione przez niego prace stanowią znaczący wkład w rozwój teoretycznej i obliczeniowej chemii organicznej. W pracach tych Habilitant wykazuje się dużym potencjałem twórczym i dobrą znajomością warsztatu z zakresu chemii obliczeniowej.

Biorąc pod uwagę wykonanie pracy doktorskiej na University of Tehran (Teheran, Iran) i jego późniejsze zatrudnienie w tej jednostce, status Visiting Researcher w Shahid Beheshti University (Teheran, Iran), staże – długoterminowy (oraz późniejsze zatrudnienie) na Uniwersytecie Masaryka (Brno, Republika Czeska), krótkoterminowe w The Arctic University of Norway (Tromsø, Norwegia) i Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Academy of Sciences (Praga, Republika Czeska) a także zatrudnienie w Instytucie Chemii Organicznej PAN i związaną z tym aktywność naukową, również współpracę naukową z prof. prof. Abhikiem Ghoshem, Kennethem Ruudem, Miquelem Solà, Michalem Straką, Diego Andrada, Sasonem Haikiem oraz Gernotem Frenkingiem udokumentowaną wspólnymi publikacjami naukowymi, **warunek istotnej aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej instytucji naukowej, zgodnie z art. 219 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce jest również wielokrotnie spełniony.**

Ocena działalności dydaktycznej

W ramach aktywności dydaktycznej dr Cina Foroutan-Nejad w latach prowadził wykłady „An Introduction to Quantum and Computational Chemistry” (2014-2020) oraz „Chemical Bond Theory” (2012-2020) na Uniwersytecie Masaryka w Brnie (Republika Czeska), zaś w okresie wcześniejszym wykłady z chemii organicznej (2006-2012) i ogólnej (2005-2012) na University of Tehran oraz Shahed University (Iran). Był również promotorem dwóch prac doktorskich: Martina Nováka (*Effect of external electric fields on chemical bonding*) oraz Esmaeila F. Bonaba (*Designing molecular devices based on endohedral fullerenes*), a także promotorem pomocniczym pracy doktorskiej Pankaj L. Bory’ego (*The effect of intermolecular interactions on magnetic properties of molecules*) i promotorem pracy magisterskiej Tomaša Jandy (*Surveying energetic and magnetic properties of C₆H₆ isomers*). Biorąc pod uwagę obecny stopień zaawansowania rozwoju naukowego uważam że jest to dużo. **Podsumowując tę część aktywności uważam, że działalność dydaktyczna jest na dobrym poziomie.** Jestem pewien że przy potencjale, jaki reprezentuje, po uzyskaniu formalnej samodzielności naukowej będzie niezwykle cennym i kreatywnym członkiem społeczności naukowej swojej Jednostki Naukowej. W mojej ocenie powinny być mu powierzane odpowiedzialne zadania służące Jej rozwojowi.

Konkluzja

Prace będące podstawą przewodu habilitacyjnego stanowią cykl monotematyczny. Stanowią znaczący wkład w rozwój teoretycznej/obliczeniowej chemii organicznej. Są istotne z punktu widzenia poznawczego. Mogą mieć przełożenie dla projektowania nowych układów o założonych właściwościach. Na podstawie dostępnych dokumentów stwierdzam, iż przesłanki o których mowa w art. 219 z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce są spełnione: Habilitant posiada stopień doktora (ust. 1 pkt 1), posiada osiągnięcia naukowe, które stanowią znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne, na które składa się jednoznacznie określony indywidualny udział w ramach cyklu powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach naukowych, które w roku opublikowania artykułu w ostatecznej formie były ujęte w wykazie sporządzonym zgodnie z przepisami wydanymi na podstawie art. 267 ust. 2 pkt 2 lit. b (ust. 1 punkt 2b oraz ust. 2), wykazuje się istotną aktywnością naukową nie tylko w swojej obecnej jednostce naukowej (Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie) ale w innych jednostkach w których był zatrudniony - w University of Tehran (Teheran, Iran) oraz w Uniwersytecie Masaryka (Brno, Republika Czeska) a także podczas staży naukowych – długoterminowym w Uniwersytecie Masaryka (Brno, Republika Czeska) oraz krótkoterminowych w The Arctic University of Norway (Tromsø, Norwegia) oraz w Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Academy of Sciences (Praga, Republika Czeska). Ma dobrze rozwiniętą współpracę krajową i międzynarodową (ust.

1 pkt 3). Jego całkowity dorobek publikacyjny jak i związana z nim aktywność naukowa są na bardzo dobrym poziomie. Podobnie oceniam jego aktywność dydaktyczną. W związku z powyższym wnioskuję do Rady Naukowej Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk o nadanie dr. Cinie Foroutan-Nejadowi stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

M.K.C.

Michał K. Cyrański