

Prof. dr hab. inż. M. Łapkowski  
Katedra Fizykochemii i Technologii  
Polimerów  
Wydział Chemiczny  
Politechnika Śląska

Gliwice, 22.11.2022

**Ocena rozprawy habilitacyjnej**  
**”Kontrolowanie procesów chemicznych przez zewnętrzne pola elektryczne:**  
**od podstaw do elektroniki molekularnej”**  
**oraz całokształtu dorobku naukowego dr. Cina Foroutan-Nejad**

Pan dr Cina Foroutan-Nejad uzyskał stopień naukowy magistra Fizycznej Chemii Organicznej na Wydziale Chemii, Uniwersytetu w Teheranie, Iran, w 2005 roku. Na tym Uniwersytecie zrealizował i obronił, w 2011 roku pracę doktorską pt.: “*Magnetic aromaticity: from NICS to bond magnetizability*”, której promotorami byli Prof. Parviz Rashidi-Ranjbar i Dr. Shant Shahbazian. Rok później wyjechał na dwuletni staż podoktorski do National Centre for Biomolecular Research, Faculty of Science, Masaryk University w Brnie, Republika Czeska, a w 2014 roku przeniósł się do Central European Institute of Technology w tym samym Uniwersytecie. Od początku roku 2020 jest zatrudniony w Instytucie Chemii Organicznej PAN w Warszawie. Pracę w tym Instytucie kontynuuje do dzisiaj, na stanowisku adiunkta od grudnia 2020 roku.

Już w trakcie realizacji pracy doktorskiej Pan dr Foroutan-Nejad zajmował się aromatycznością związków chemicznych z naciskiem na ich aromatyczność magnetyczną. Tą tematyką zajmował się w późniejszych latach a opublikowane rezultaty stanowią podstawę przedstawionej do oceny rozprawy habilitacyjnej, której główną częścią jest 51 stronicowy autoreferat pod tytułem „*Kontrolowanie procesów chemicznych przez zewnętrzne pola elektryczne: od podstaw do elektroniki molekularnej*”, oraz zestaw 7 publikacji w czasopismach naukowych.

Pan dr Foroutan-Nejad prowadząc obliczenia teoretyczne szukał wysoce magnetyzowanych związków, które mogłyby oddziaływać ze sobą bez tworzenia klasycznych wiązań kowalencyjnych oraz mających kilka izomerów konformacyjnych. Wykorzystanie takich cząsteczek w elektronice molekularnej polegałoby na zmianie ich konformacji zewnętrznym polem magnetycznym. Gdyby można było stworzyć

uporządkowaną matrycę takich cząsteczek, dałoby się wykonać maszyny molekularne sterowane zewnętrznym polem magnetycznym.

Pan dr Foroutan-Nejad, jako przykład nadający się do prostych obliczeń, wybrał kompleks dwóch małych cząsteczek, benzenu i  $Al_4^{2-}$ , z których drugi tworzy podwójnie aromatyczny klaster nieorganiczny. Jego obliczenia przeprowadzone metodą M06/6-311++G(3d2f,2df,2p) wykazały istnienie dwóch rodzajów minimów energetycznych pomiędzy oddziałującymi ze sobą benzenem i  $Al_4^{2-}$ , gdy przeciwjon jest jednododatni (np.  $Li^+$ ,  $K^+$ ), podczas gdy w przypadku jonów dwudodatnich (np.  $Ca^{2+}$ ,  $Mg^{2+}$ ) otrzymuje się kompleks o jednym minimum energetycznym mającym strukturę kanapkową. Niestety obliczenia wpływu pola magnetycznego na różnicę energii pomiędzy dwoma konformerami takich kompleksów wykazały, że jest ona bardzo mała i wynosi zaledwie  $0,05 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1}$ . Układ elektroniczny wykorzystujący takie cząsteczki musiałby więc działać w temperaturach bliskich zera bezwzględnego.

Pomimo wykazania, że kompleksy benzen- $Al_4^{2-}$  nie nadają się do zastosowań w elektronice molekularnej, Habilitant uzyskał ciekawy wynik, pokazujący zależność trwałości konformera od ładunku przeciwjonu, co było wcześniej nieznaną i stanowi jedną z istotnych nowości badawczych. Ponieważ kationy będące przeciwjonami powinny wpływać na konformację jedynie w wyniku działania lokalnego pola elektrycznego Habilitant postanowił sprawdzić wpływ serii anionów halogenkowych na kompleksy benzenu i znacznie większego analogu aromatycznego: koronenu. W takim przypadku energia oddziaływań powinna rosnąć, gdy odległość między anionami i pierścieniem aromatycznym maleje, jednak nieoczekiwane rezultaty obliczeń okazały się inne. Okazało się, że podobne wyniki uzyskali inni badacze. Pan dr Foroutan-Nejad postanowił dokładniej przyjrzeć się podstawom fizycznym tego zjawiska i zauważył błąd polegający na nieprawidłowym opisie oddziaływania jon- $\pi$  w obecności zewnętrznego pola elektrycznego. Zaproponował nowy model obliczeniowy uwzględniający te oddziaływania, w którym momenty dipolowe będą identyczne tylko w przypadku, gdy molekula ma zerowy ładunek, natomiast w innym przypadku będą zależały od położenia. W związku z tym zależność całkowitej energii zależy od położenia również w obecności zewnętrznego pola elektrycznego, co wyjaśniło nietypowe zachowanie w racjonalny sposób. Okazało się, że ten model jest ważny dla każdego układu kompleksów kation- $\pi$  w obecności zewnętrznego pola elektrycznego i pozwala stwierdzić, że zwiększa ono stopień kowalencyjności wiązania między jonami

a cząsteczkami aromatycznymi, co zostało potwierdzone doświadczalnie. Badania te zostały przez Aurora poszerzone o aromatyczne cząsteczki polarne, gdzie koronen był podstawiany grupami elektrono-akceptorowymi i elektrono donorowymi. Pan dr Foroutan-Nejad przedstawił model teoretyczny obliczeń takich układów, który wykazał, że zmiany energii wiązania polarnych koronenów jako funkcja zewnętrznego pola elektrycznego różni się od zmian momentów multipolowych lub polaryzowalności. Moim zdaniem ten wynik jest bardzo ważnym osiągnięciem Habilitanta.

Drugim zagadnieniem, którym się zajął dr Foroutan-Nejad, było opracowanie urządzenia nazwanego memrystor, które nadawałoby się do zastosowania w elektronice molekularnej. Badania takich urządzeń są prowadzone od wielu lat, jednak dotychczasowe wyniki nie doprowadziły do opracowania technologii nadającej się do wdrożenia. Muszę przyznać, że dr Foroutan-Nejad podszedł do rozwiązania zagadnienia kompleksowo, to znaczy najpierw przeprowadził solidną analizę literatury i możliwości uzyskania pozytywnych wyników wykorzystując dotychczas stosowane układy molekularne, a następnie wyselekcjonował możliwe układy, które poddał analizie. Najciekawsze okazały się endohedralne cząsteczki wyższych fullerenów z uwiecznionymi cząsteczkami liniowymi. Przeprowadził obliczenia *First principles* odpowiedzi na zorientowane zewnętrzne pole elektryczne oraz przeanalizował właściwości prostownicze obliczając metodą nierównowagowych funkcji Greena. Obliczenia te wykazały, że najlepsze wyniki uzyskuje się, gdy zamkniętą wewnątrz fullerenu cząsteczką będzie związek typu metal-niemetal, natomiast dla polarnych cząsteczek organicznych uzyskał wyniki niezadawalające. Wykazał również, że im większa jest wartość polaryzowalności i hiperpolaryzowalności, tym jest niższe zewnętrzne pole elektryczne, przy którym indukowany moment dipolowy ma większą wartość od trwałego dipola. Bazując na tych obliczeniach Habilitant zaproponował memrystor Fullerenowy, działający przez zewnętrzne pole elektryczne i kontrolowane przez elektrodę bramki. Główną wadą tego rozwiązania była niska temperatura działania 1,6 K, oraz trudna synteza endohedralnego fullereny. Pomimo tego uważam, że ta część pracy jest bardzo ważna i stanowi najistotniejsze osiągnięcie naukowe Kandydata.

Na dorobek naukowy Kandydata składa się 49 publikacji w czasopiśmie znajdujących się w bazie Journal Citation Report (JCR), z których 9 stanowią podstawę rozprawy habilitacyjnej, 6 patentów krajowych i 6 zgłoszeń patentowych, oraz 6

wystąpień ustnych na konferencjach krajowych i międzynarodowych. Dorobek jest znaczący a wszystkie artykuły zostały ogłoszone w specjalistycznych czasopismach naukowych. Również wybrane do habilitacji artykuły zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach, dla których sumaryczny współczynnik wpływu (Impact Factor) wynosi 74,1, czyli na jeden artykuł  $IF = 8,23$ . Jest to wynik bardzo dobry, co świadczy, że Habilitant opublikował swoje wyniki w czasopismach o wysokim rankingu. Wszystkie artykuły są wieloautorskie, w których w czterech Pan dr Foroutan-Nejad figuruje na pierwszym miejscu listy autorów, a w 6 jest wymieniany, jako corresponding author. Świadczy to o dużym wkładzie Habilitanta w opracowanie koncepcji pracy, wykonanie pomiarów, opracowanie wyników, oraz redagowanie artykułów, a oświadczenia współautorów jednoznacznie potwierdzają jego często decydujący wkład w pracach wieloautorskich.

Analizując wszystkie artykuły, które dr Foroutan-Nejad przedstawił, jako dorobek habilitacyjny można stwierdzić, że jest bardzo homogeniczny i zdecydowanie ukierunkowany otrzymanie membrystorów fullerenowych.

Publikacje, stanowiące podstawę habilitacji, zostały ogłoszone w specjalistycznych czasopismach z listy Journal Citation Report (JCR):

1. Journal of the American Chemical Society ;  $IF = 15,419$ ,
2. Journal of Physical Chemistry C;  $IF = 4,126$ ,
3. Physical Chemistry Chemical Physics;  $IF = 3,676$ ,

Dorobek habilitacyjny został uzyskany w latach 2012-20, a jego wartość merytoryczną należy uznać za nieco powyżej średniej, jak dla Kandydata do stopnia naukowego doktora habilitowanego, ze względu na jakość czasopism, w których został opublikowany. Tematyka cyklu publikacji jest bardzo nowoczesna i mająca potencjalnie poważne znaczenie aplikacyjne, co świadczy o dobrym rozeznanii dr. Foroutan-Nejada w najnowszych ważnych trendach badawczych, uważanych na świecie za wiodące. W dodatku Habilitant nie skupił się na jednym specyficznym zagadnieniu badawczym, czy też zastosowaniu, ale zaprezentował kilka różnych celów, z których co najmniej jeden jest bardzo nowatorski. Tematyka publikacji jest monotematyczna i nie ma żadnych wątpliwości, że spełnia warunek „Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” (opublikowanej 30 sierpnia 2018), o którym mowa w Rozdziale 3 Art. 219.1, punkt b o „powiązanych tematycznie cyklu publikacji naukowych opublikowanych w czasopismach naukowych”. W

autoreferacie oraz kolejnych artykułach Pan dr Foroutan-Nejad opisuje, w jaki sposób osiąga postawione sobie cele badawcze i aplikacyjne. Ponieważ wszystkie artykuły są wieloautorskie Habilitant omawia szczegółowo wkład własny wniesiony do realizacji postawionych celów.

Przełgądając publikacje wchodzące w skład habilitacji można znaleźć kilka istotnych innowacji wprowadzonych przez Autora, z których najważniejsze moim zdaniem to:

- określenie zależności trwałości konformera kompleksów benzen- $Al_4^{2-}$  od ładunku przeciwjonu,
- opracowanie nowego modelu obliczeniowego uwzględniającego oddziaływania jon- $\pi$ , oraz ich zależność od położenia,
- otrzymanie działających memrystorów z użyciem endohedralnych Fullerenów,

Wymienione powyżej udoskonalenia i innowacje stanowią istotny wpływ Habilitanta w rozwój wiedzy oraz budowy urządzeń elektroniki molekularnej. Można więc stwierdzić, że warunek zawarty w Ustawie „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce”, mówiący o wkładzie Kandydata w rozwój dyscypliny naukowej, jest spełniony.

Pozostały dorobek naukowy dr. Foroutan-Nejada składa się z 44 publikacji ogłoszonych po uzyskaniu stopnia doktora. Jest to dorobek bardzo znaczny, znacznie powyżej średniej dla podobnych wniosków, które miałem okazję recenzować. Ponadto należy dodać, że sporo artykułów zostało opublikowanych w najlepszych czasopismach o obiegu międzynarodowym, takich jak: Nature (IF = 49,962); Nature Communication (IF = 14,919); Angew. Chem. Int. Ed. (IF = 15,336) i J. Am. Chem. Soc (IF = 15,419). Można więc stwierdzić, że ten dorobek w niezwykle istotnym stopniu uzupełnia osiągnięcia naukowe Habilitanta.

Według bazy danych ISI Web of Science artykuły Pana dr. Foroutan-Nejada uzyskały, na dzień 14.11.2022 r., ponad 1344 niezależnych cytowań (z czego znacząca część dotyczy cytowań artykułów przedstawionych, jako rozprawa habilitacyjna), co daje ponad 24 cytowania na artykuł, oraz H-indeks = 23. Jest to wynik bardzo dobry, przy czym należy zwrócić uwagę na dynamicznie rosnącą ilość cytowań po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Są to wyniki przekraczające wartość średnią wymaganą od kandydata do stopnia doktora habilitowanego. Podsumowując całość przesłanego do oceny materiału, oceniam go pozytywnie z następujących powodów:

- Kandydat uzyskał znaczące osiągnięcia naukowe,

- Tematyka badawcza jest bardzo nowoczesna i przyszłościowa,
- Tematyka rozprawy ma poważne znaczenie aplikacyjne,
- Znaczna część artykułów została opublikowana w bardzo dobrych lub dobrych czasopismach,
- Artykuły uzyskały znaczący oddźwięk wśród społeczności naukowej.

Dorobek dydaktyczny dr. Foroutan-Nejada jest bardzo skromny, co jest normalne dla pracownika nie akademickiego. Po przyjeździe do Polski pracował w ramach grantu jako pracownik naukowy, a do jego działalności dydaktycznej można zaliczyć opiekę nad pracami magisterskimi, oraz promotorstwo 3 prac doktorskich wykonanych jeszcze w Republice Czeskiej. Angażował się natomiast intensywnie w recenzowanie prac innych naukowców w takich wydawnictwach jak Elsevier, ACS i MPDI, gdzie dorobił się statusu “outstanding reviewer”.

Podsumowując wszystkie elementy konieczne do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego można stwierdzić, że dorobek naukowy dr. Foroutan-Nejada jest bardzo dobry i całkowicie równoważy niewielkie osiągnięcia dydaktyczne i organizacyjne. Jest to zrozumiałe, gdyż jest on obcokrajowcem pracującym w PAN, który był zaangażowany w prace naukowe, bez możliwości prowadzenia zajęć dydaktycznych. Uważam, że przedstawiona do oceny rozprawa habilitacyjna Kandydata świadczy, że jest on zdolny do podejmowania poważnych zadań naukowych, umie je realizować bądź samodzielnie, bądź w większych zespołach oraz wykazuje się znaczną pomysłowością i wyobraźnią konieczną w realizacji nowatorskich projektów badawczych. Jego dorobek naukowy, opublikowany w specjalistycznych czasopismach, wnosi poważny i bardzo często nowatorski wkład do poznania zjawisk związanych z pracą urządzeń elektroniki molekularnej. Stawiam więc wniosek o dalsze procedowanie rozprawy zgodnie z ustawowymi wymogami.

Mieczysław Łapkowski

