



Politechnika Wrocławska

Wydział Chemiczny

Dr hab. inż. Robert W. Góra, prof. uczelni

Zakład Chemii Fizycznej i Kwantowej

robert.gora@pwr.edu.pl

T: +48 508 113 816

Recenzja dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego dr. Michała Filipa Rode w związku z Jego ubieganiem się o stopień naukowy doktora habilitowanego

Sylwetka Kandydata

Dr. Michał Rode swoją karierę naukową rozpoczął w 1998 roku w pracowni Prof. Joanny Sadlej na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Pod kierunkiem Pani Profesor uzyskał tytuł magistra chemii (1998) oraz stopień doktora nauk chemicznych (2003). W tym okresie ukazały się pierwsze publikacje naukowe, których był współautorem, a które koncentrowały się na badaniach natury oddziaływań w słabo związanych kompleksach molekularnych z wykorzystaniem metod chemii kwantowej. Po obronie doktoratu odbył dwa staże podoktorskie. W latach 2003–2004 na Wydziale Chemii Oakland University w pracowni prof. Małgorzaty Szczęśniak, a następnie w latach 2004–2005 w zespole prof. Hansa-Joachima Wernera na Uniwersytecie Stuttgarckim. Choć dorobek naukowy z tego okresu nie jest może imponujący, biorąc pod uwagę zarówno niewielką liczbę prac (zaledwie 3) jak i zaangażowanie Kandydata w ich powstanie (jedynie w jednej z tych prac, powstałych we współpracy z prof. Wernerem, swój udział określił jako wiodący), to należy podkreślić, że jedna z nich ukazała się w bardzo prestiżowym czasopiśmie *Physical Review Letters*. Ocena późniejszego dorobku Kandydata sugeruje jednak, że wspomniane staże nie zaowocowały trwałą współpracą bądź zmianą tematyki badawczej. A szkoda, bo to znakomite ośrodki badawcze.

Kluczowe dla dalszego rozwoju kariery naukowej Habilitanta okazało się zatrudnienie w 2005 roku na stanowisku adiunkta w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk (PAN) w Warszawie. W zespole prof. Andrzeja Sobolewskiego podjął On nową tematykę badawczą, która zdominowała Jego późniejsze zainteresowania naukowe, a którą określiłbym jako badania fotochemii i fotofizyki układów heteroaromatycznych, z wykorzystaniem metod obliczeniowych molekularnej mechaniki kwantowej. Pierwszy artykuł będący efektem tej współpracy ukazał się w 2008 roku i otwiera on zarazem cykl powiązanych tematycznie publikacji będący podstawą do wszczęcia postępowania o

nadanie Mu stopnia doktora habilitowanego. Kolejne lata przynoszą dalsze systematyczne badania fotofizyki układów wykazujących wewnątrz- i międzycząsteczkowe przeniesienie protonu w stanach elektronowo wzbudzonych w kontekście ich potencjalnego wykorzystania jako molekularnych fotoprzełączników. Uzyskane wyniki zebrane zostały w pracach H1-H5, wskazanych jako osiągnięcie naukowe Habilitanta. Do oceny tego cyklu prac odniosę się bardziej szczegółowo w dalszej części swojej recenzji, warto jednak nadmienić, że dr Rode jest również współautorem kolejnych 8 artykułów (oznaczonych w autoreferacie jako P1-P8) wpisujących się w ten nurt badań, a zaliczyłbym tu także prace M12 i M13. Również pozostałe artykuły opublikowane przy współudziale Habilitanta w okresie jego zatrudnienia w Instytucie Fizyki (prace M7-M15) dotyczą szeroko pojętych badań fotofizyki układów molekularnych, interesujących w kontekście elektroniki molekularnej bądź jako modelowe układy dla poznania mechanizmów procesów fototautomerii, fotoizomeryzacji czy bezpromienistej dezaktywacji. Warto podkreślić, że wiele z tych prac powstało we współpracy z zespołami eksperymentalnymi.

W 2013 roku zmianie uległa forma zatrudnienia Habilitanta z adiunkta na asystenta, pozostaje on jednak zatrudniony w tej samej jednostce naukowej. Zmiana ta wynikała jak sądzę z wymogów ustawowych w związku z nieuzyskaniem stopnia doktora habilitowanego w przeciągu 8 lat od zatrudnienia na stanowisku adiunkta.

Formalna ocena dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego Habilitanta

Zanim przejdę do oceny merytorycznej osiągnięcia naukowego będącego przedmiotem wniosku, chciałbym skomentować wskaźniki scjentometryczne dorobku naukowego Habilitanta.¹

Dr Rode w momencie składania wniosku był współautorem 33 artykułów naukowych, opublikowanych w czasopiśmie z listy Journal Citation Reports (JCR) z pierwszego i drugiego kwartyłu, w tym tak prestiżowych jak *Physical Review Letters* czy *Chemistry – A European Journal*. 28 artykułów ukazało się po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych. Sumaryczny współczynnik oddziaływania (ang. impact factor, IF) opublikowanych prac, obliczony zgodnie z rokiem ich opublikowania, wynosi 101,36, co daje bardzo dobrą średnią (powyżej 3) jak na dziedzinę fizyki molekularnej czy chemii obliczeniowej. Artykuły te spotkały się ze sporym odzewem środowiska naukowego. Według bazy Web of Science na dzień składania wniosku były one cytowane 648 razy (581 razy z wyłączeniem autocytowań), zaś indeks Hirscha Habilitanta wyniósł 13.

Znacznie słabiej wypada ocena aktywności Habilitanta w zakresie pozyskiwania środków na finansowanie badań naukowych. W trakcie swojej 20 letniej kariery naukowej nigdy nie kierował

¹ Zgodnie z rozporządzeniem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011 roku w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego (Dz.U. Nr 196, poz. 1165).

On krajowym lub międzynarodowym projektem badawczym, finansowanym ze środków na badania naukowe. W okresie po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych był jednak wykonawcą dwóch grantów kierowanych przez prof. Andrzeja Sobolewskiego (finansowanych ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach konkursów Harmonia 1 i Maestro 2), grantu kierowanego przez dr. hab. Jerzego Karpiuka (finansowanego ze środków Narodowego Centrum Badań i Rozwoju), a obecnie jest wykonawcą w grantie kierowanym przez dr. hab. Gotarda Burdzińskiego (który uzyskał finansowanie w ramach konkursu Opus 14 Narodowego Centrum Nauki).

W autoreferacie brak wzmianki o nagrodach za działalność naukową. Wnioskodawca wymienił jedynie wyróżnienie za prezentację posterową na ogólnopolskiej konferencji Kryształ Molekularne w 2010 roku i okładkę w czasopiśmie *Chemistry – A European Journal* z 2018 roku, w związku z publikacją artykułu, którego był jednym z dwóch autorów korespondencyjnych, a swój udział w jego powstaniu oszacował na 30%.

Biorąc pod uwagę 20 letni okres kariery naukowej mało imponująco wygląda również wykaz wygłoszonych referatów na międzynarodowych lub krajowych konferencjach tematycznych. Habilitant wymienia jedynie 5 wykładów, w tym trzy na konferencjach *Molecules and Light* organizowanych cyklicznie w Zakopanem (nadmienię, że w dwóch ostatnich konferencjach pełnił on również funkcję członka komitetu organizacyjnego lub powitalnego), jeden na polsko-francuskich warsztatach elektroniki organicznej i nanofotoniki w Świeradowie Zdroju oraz jeden na konferencji *Polish Photochemistry Seminar* w Lipniku. Żaden z wymienionych wykładów nie był wykładem na zaproszenie. Habilitant wymienia również listę 7 wystąpień seminaryjnych, w większości są to jednak wystąpienia w jednostkach w których Habilitant był aktualnie bądź wcześniej zatrudniony. Pewien wyjątek stanowi tu wykład na zaproszenie w Zakładzie Fizyki Chemicznej Uniwersytetu w Lund (Szwecja). Wykaz wystąpień konferencyjnych zamyka lista 15 prezentacji plakatowych na krajowych i międzynarodowych konferencjach różnej rangi.

Dr Rode bywa zapraszany do recenzowania artykułów naukowych w czasopismach z listy JCR. W latach 2008-2019 był on recenzentem 12 takich artykułów m.in. dla *Journal of Molecular Structure* (trzykrotnie), *Chemical Physics Letters* (dwukrotnie), *Journal of Chemical Physics* (dwukrotnie), czy *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* (dwukrotnie).

Bardzo skromny jest również dorobek dydaktyczny Habilitanta. Jest to jednak zrozumiałe i wynika ze specyfiki zatrudnienia w instytucie badawczym PAN. W autoreferacie wymienione są jedynie zajęcia dydaktyczne prowadzone przez dr. Rode jeszcze w ramach pensum dydaktycznego doktoranta Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Były to ćwiczenia ze spektroskopii molekularnej, zajęcia laboratoryjne z chemii fizycznej oraz laboratorium komputerowe. Warto jednak zauważyć, że dr Rode sprawował, jak to określił, *opiekę naukową* nad dwiema magistrantkami oraz był zaangażowany w podobnym charakterze w dwóch przewodach doktorskich. Pomimo, że w żadnym z obu wymienionych wypadków nie był On promotorem pomocniczym to efektem tej współpracy są wspólne publikacje z doktorantami (trzy z dr Joanną Jankowską i jedna z mgr. Bartłojem Sa-

dowskim).

Podsumowując powyższą syntetyczną prezentację sylwetki Kandydata rysuje się obraz doświadczonego już naukowca, który powoli lecz systematycznie rozwija swój warsztat badawczy i karierę naukową. Jest kompetentnym i cenionym wykonawcą w projektach badawczych, co poniekąd rekompensuje brak aktywności w pozyskiwaniu środków na realizację własnych badań naukowych. Choć rozpoznawalność Kandydata na arenie międzynarodowej jest umiarkowana, o czym świadczy zarówno jego niewielka aktywność konferencyjna jak i skromna ilość zaproszeń do recenzowania artykułów naukowych, to należy podkreślić, że dorobek naukowy Habilitanta spotkał się ze znacznym odzewem środowiska naukowego, o czym świadczy duża liczba niezależnych cytowań.

Rzecz jasna trudno nie dostrzec istotnej roli jaką w rozwoju naukowym Habilitanta odegrała współpraca z prof. Andrzejem Sobolewskim. Jest on współautorem wszystkich artykułów z cyklu habilitacyjnego (prace H1-H5) oraz zdecydowanej większości pozostałych artykułów opublikowanych przy współudziale Habilitanta po jego zatrudnieniu w Instytucie Fizyki PAN (na 19 takich artykułów jedynie w 5 nie odnalazłem prof. Sobolewskiego wśród autorów). Biorąc pod uwagę powyższą analizę można mieć pewne wątpliwości co do samodzielności naukowej Habilitanta. Dlatego dla mojej ostatecznej oceny wniosku Habilitanta rozstrzygająca była analiza przedstawionego osiągnięcia naukowego.

Ocena osiągnięcia naukowego Habilitanta

Przedstawione do oceny osiągnięcie naukowe, zatytułowane "Teoretyczna optymalizacja właściwości molekularnego przełącznika protonowego sterowanego optycznie lub polem elektrycznym", stanowi cykl pięciu powiązanych tematycznie artykułów, które ukazały się w latach 2008–2016. Opublikowane one zostały w renomowanych czasopismach z listy JCR (dwie w *Chemical Physics*, dwie w *Journal of Chemical Physics* i jedna w *Journal of Physical Chemistry A*) o sumarycznym współczynniku oddziaływania IF 12,57 (średnio 2,51 na publikację). Artykuły te spotkały się ze sporym oddźwiękiem w literaturze przedmiotu i były cytowane już ponad 100 razy. W szczególności dotyczy to pierwszych dwóch artykułów z cyklu, z których praca H1 była cytowana 25 razy, zaś praca H2 była przywoływana aż 51 razy. W mojej ocenie już przytoczone wskaźniki scientometryczne wskazują na istotny wkład Habilitanta w rozwój dyscypliny naukowej.

Wprawdzie żadna z publikacji w cyklu nie jest pracą samodzielną, to należy podkreślić, że dr Rode jest ich pierwszym autorem, a w czterech z pięciu artykułów jest też jedynym autorem korespondencyjnym. Wskazuje to na wiodącą rolę Habilitanta w powstaniu tych artykułów, o czym świadczą też jednoznacznie oświadczenia współautorów: prof. Andrzeja Sobolewskiego, który był współautorem wszystkich pięciu prac z cyklu, oraz dr Joanny Jankowskiej, która była współautorką ostatniego artykułu w cyklu (H5). Nadmienię, że wszystkie oświadczenia są zgodne a udział procentowy Habilitanta we wszystkich pracach z cyklu waha się w granicach 80-85%.

Cykl otwiera artykuł H1 poświęcony badaniom metodami chemii kwantowej ab initio fotofizyki wewnątrz- i międzycząsteczkowego procesu fotoindukowanego przeniesienia protonu. Jako modelowe układy wykorzystano cząsteczkę 2-(2'-pirydylo)pirolu (**2PP**) oraz dimer cząsteczek pirydyny i pirolu z międzycząsteczkowym wiązaniem wodorowym. **2PP** został zsyntetyzowany i gruntownie przebadany spektroskopowo kilka lat wcześniej przez Kijaka i wsp. (referencje 47-48 w autoreferacie) jako modelowy układ dla serii podobnych związków, badanych wówczas intensywnie w zespole prof. Jacka Waluka z Instytutu Chemii Fizycznej PAN, charakteryzujących się rotameryą strukturalną typu *syn-anti* oraz fotoindukowaną tautomerią. Badania eksperymentalne przeprowadzono zarówno w wiązkach naddźwiękowych jak i w wybranych protycznych i aprotycznych rozpuszczalnikach o różnej polarności (ref. 48 w autoreferacie). Wyniki wskazywały m.in. na możliwość występowania badanej cząsteczki w postaci rotamerów *syn* lub *anti* w zależności od użytego rozpuszczalnika oraz występowanie dwóch pasm fluorescencji w niepolarnych rozpuszczalnikach, które sugerowało występowanie procesu fotoindukowanego wewnątrzcząsteczkowego przeniesienia protonu w stanie wzbudzonym (ang. excited-state intramolecular proton transfer, ESIPT). Obecność dwóch pasm emisji przypisano współistnieniu dwóch tautomerów formy *syn*. Jednym z głównych celów pracy H1 była weryfikacja postulowanego na podstawie wyników eksperymentalnych mechanizmu występowania fototautomerii w cząsteczce **2PP** oraz roli stanów z przeniesieniem ładunku (ang. charge transfer, CT) w wygaszaniu fluorescencji w tym i podobnych układach, postulowanej już w latach '50 ubiegłego wieku przez Matagę i wsp. (cf. praca H1 i prace tam cytowane). Dlatego z pewnym zdziwieniem odnotowałem, że wspomniany artykuł Kijaka i wsp. (*Chem. Phys. Lett.* **2004**, *400*, 279–285) nie został zacytowany w pracy H1. Jak wnoszę z lektury pracy H1 w jego miejsce omyłkowo zacytowano artykuł Wiosny i wsp. z tego samego numeru, poświęcony jednakowoż wygaszaniu fluorescencji izomerów 7-(pirydylo)indolu (*Chem. Phys. Lett.* **2004**, *400*, 379–383).

Pozwoliłem sobie na dłuższy komentarz na temat motywacji wyboru cząsteczki **2PP** w pracy H1, ponieważ są one istotne dla ustalenia inspiracji dla dalszych prac w cyklu. Przyznam, że w tej kwestii Habilitant był w swoim autoreferacie mało precyzyjny. Píše on, cytując: *“badania fotofizyki tej cząsteczki [...] zaowocowały pomysłem nad takim przekształceniem struktury [...] aby uzyskane właściwości fotofizyczne [...] pozwalały na jej zastosowanie jako optyczny przełącznik molekularny”*. Nie wykluczam, że tak było w istocie jednak należy zauważyć, że w tym samym roku w czasopiśmie *Physical Chemistry Chemical Physics* ukazała się samodzielna praca prof. Sobolewskiego (referencja 44 w autoreferacie), w której przedstawił on w mojej ocenie autorską ideę fotoprzełącznika molekularnego działającego w oparciu o proces ESIPT (choć podobne układy były opisywane w literaturze już wcześniej m.in. przez cytowanego w pracy Sobolewskiego Varmę i wsp.), odwołując się raczej do dobrze opisanego w literaturze mechanizmu wygaszania fluorescencji na skutek ESIPT oraz swoich wcześniejszych wyników uzyskanych m.in. dla kwasu salicylowego. W zaproponowanej przez prof. Sobolewskiego nowej klasie funkcjonalnych związków organicznych, bezbarirowy, ultraszybki, fotoindukowany proces ESIPT prowadzi do bezpromienistej dezaktywacji układu

przez przecięcie stożkowe do jednej z dwóch stabilnych form. Ponieważ różnią się one położeniem maksimum pasma absorpcji, hipotetycznie możliwe jest selektywne przełączanie układu poprzez naświetlanie odpowiednio dostrojoną wiązką promieniowania ultrafioletowego (UV).

Nie twierdzę, że badania krajobrazu powierzchni energii potencjalnej cząsteczki **2PP** nie są w tym kontekście interesujące. Jest też rzeczą zrozumiałą, że Habilitant stara się uwypuklić swoje osiągnięcia, jednak w mojej ocenie, na podstawie gruntownej analizy zarówno prac z cyklu habilitacyjnego jak i literatury przedmiotu oczywistym jest, że kolejne prace z cyklu (H2-H4) są raczej twórczym rozwinięciem oryginalnej idei prof. Sobolewskiego, przedstawionej w przytoczonym wcześniej artykule (jest on też przywoływany w abstrakcie artykułu H2). Habilitant wspomina zresztą o tym w dalszej części autoreferatu (na stronie 19 w wersji polskojęzycznej), choć przedstawiając nieco inne motywacje niż te, do których prof. Sobolewski odwołuje się w swojej pracy. Dowodzi to pewnej niefrasobliwości Habilitanta. Choć autoreferat w myśl ustawy nie jest przedmiotem oceny to pozwolę sobie zauważyć, że można odnieść wrażenie, że poszczególne jego fragmenty powstawały na przestrzeni dość długiego okresu czasu i zabrakło być może ostatecznej redakcji, która pozwoliłaby uniknąć wielokrotnej dyskusji tych samych wątków i podobnych nieporozumień.

W kolejnych artykułach z cyklu (H2-H4) Habilitant przedstawia wyniki swoich badań z wykorzystaniem metod obliczeniowych molekularnej mechaniki kwantowej nad optymalizacją krajobrazu powierzchni energii potencjalnej w niskoleżących stanach elektronowych pochodnych 7-hydroksychinoliny pod kątem ich potencjalnego wykorzystania jako fotoprzełączników molekularnych. W oryginalnej pracy prof. Sobolewskiego cząsteczka 7-hydroksychinoliny, pełniąc rolę szkieletu molekularnego z dwoma centrami donorowo-akceptorowymi protonu, podstawiona była pochodną oksazyny, działającą jako tzw. *dźwig protonowy*, umożliwiający przeniesienie protonu w stanie wzbudzonym z jednoczesną rotacją i zmianą izomerii *syn-anti* w procesie bezpromienistej dezaktywacji. W autoreferacie hipotetyczne fotoprzełączniki tego typu określone zostały jako TPT (ang. twist-assisted ESIPT).

W pracy H2, którą uważam w sensie poznawczym za jedną z bardziej wartościowych z cyklu, przebadano wpływ różnych podstawień szkieletu molekularnego 7-hydroksychinoliny oraz wykorzystania innych grup funkcyjnych jako dźwigu protonowego na widmo niskoleżących stanów elektronowych i kształt ich powierzchni energii potencjalnej. Jest to też najczęściej, bo ponad 50 razy, cytowana praca w cyklu. Uzyskane rezultaty sugerowały korzystny wpływ podstawień szkieletu molekularnego grupami elektronowodonorowymi. Natomiast podstawienia grupami elektronowoakceptorowymi pierścienia pirydyny, pełniąc rolę dźwigu protonowego, zdawały się dodatkowo wzmacniać ten efekt. Habilitant szczególnie ceni sobie sugestię wykorzystania grupy aldehydowej jako dźwigu protonowego, co podkreśla w swoim autoreferacie. Istotnie, rok wcześniej niż praca H2 ukazał się w *ChemPhysChem* przy Jego współudziale artykuł Łapińskiego i wsp. (oznaczony w autoreferacie jako P2), w którym po raz pierwszy zademonstrowano eksperymentalną realizację koncepcji prof. Sobolewskiego w oparciu o zarejestrowane widma w podczerwieni cząsteczki 7-hydroksy-4-

metrylochinolino-8-karboaldehydu w argonowych matrycach niskotemperaturowych, naświetlanych uprzednio promieniowaniem UV o odpowiednio dobranym zakresie spektralnym. To ciekawa praca i wobec powyższego nie rozumiem dlaczego nie została uwzględniona w cyklu habilitacyjnym.

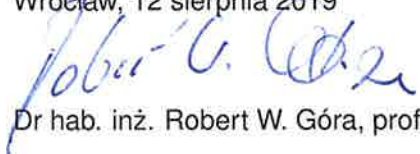
W pracach H3 i H4 mechanizm *dźwigu protonowego* Habilitant zastąpił procesem podwójnego przeniesienia protonu w stanie wzbudzonym za pośrednictwem podstawnika pełniącego rolę zarówno akceptora jak i donora protonu. Zabieg ten dawał nadzieję na skrócenie czasu fotoprzełączenia w układach typu TPT, który na podstawie szacunków eksperymentalnych może wynosić nawet setki pikosekund (tu w autoreferacie wkradł się błąd w cytowaniu 53 – chodziło oczywiście o pracę van der Loopa i wsp. *J. Phys. Chem. B* **2014**, *118*, 12965-12971). Inspiracją były w tym wypadku doniesienia eksperymentalne potwierdzające występowanie procesu podwójnego ESIPT (DESIPT) w cząsteczce kwasu 7-hydroksychinolo-8-karboksylowego. Wstępne obliczenia dla tego układu wskazywały jednak na zbyt małą stabilność jednej z form w stanie podstawowym i ostatecznie autorzy skupili się na fotofizyce cząsteczki kwasu 3-hydroksypikolinowego (**3HPA**). W pracy H3 wykazano, że mechanizm DESIPT w cząsteczce **3HPA** polega na sekwencyjnym, kaskadowym procesie, jednak w stanie podstawowym obie formy tautomeryczne oddzielone były nadal zbyt niską barierą energetyczną w kontekście potencjalnych zastosowań tego układu jako fotoprzełącznika. Dlatego w kolejnej pracy z cyklu (H4) autorzy postanowili zbadać wpływ możliwych modyfikacji struktury **3HPA** na kształt powierzchni energii potencjalnej w stanie podstawowym i pierwszym stanie wzbudzonym. Choć wyniki uzyskane w pracach H3 i H4 są interesujące w sensie poznawczym, nie sądzę aby dawały one nadzieję na konstrukcję przełącznika molekularnego w oparciu o mechanizm DESIPT. Z mojej perspektywy najciekawsze wnioski płynące z tych prac dotyczą roli niskoleżących stanów $n\pi^*$ w fotofizyce badanych układów.

Cykl kończy praca H5 w której Habilitant rozważa model molekularnego przełącznika sterowanego zewnętrznym polem elektrycznym na przykładzie cząsteczki **DSA**, będącej pochodną heteroaromatycznej zasady Schiffa, mogącą występować w czterech formach tautomerycznych różniących się wartościami i zwrotem momentu dipolowego. To ciekawa praca, choć mam pewne wątpliwości co do zastosowanej metodologii obliczeniowej. Aby wyznaczyć krytyczne wartości pola elektrycznego, przy którym następuje bezbarierowy przeskok protonu, przeprowadzono szereg optymalizacji geometrii cząsteczki w jednorodnym polu elektrycznym przyłożonym, cytuję, *zgodnie z główną osią cząsteczki*. Choć geometria badanego układu istotnie ma kwaziliniowy charakter to żaden z jej tautomerów nie ma osi symetrii, a za główną oś cząsteczki przyjęto prostą przechodzącą przez terminalne atomy węgla (oznaczone jako C1–C2). Nie wiem jednak w jaki sposób udało się zachować zgodny z *główną osią cząsteczki* wektor pola elektrycznego bez zastosowania specjalnej procedury pozwalającej na ścisłe zachowanie tzw. warunków Eckarta (Eckart, *Phys. Rev.* **1926**, *28*, 711), a w artykule nie znajdujemy na ten temat żadnej wzmianki. Jak sądzę za każdym razem cząsteczka orientowała się w procesie optymalizacji geometrii zgodnie z jej momentem dipolowym, którego kierunek był co najwyżej zbliżony do wektora C1–C2. Wskazuje na to również sposób

przedstawienia wartości momentu dipolowego w materiałach dodatkowych, gdzie podane zostały wartości składowych równoległych do osi C1–C2 (oczywiście bez problemu można było zapewnić taką orientację w obliczeniach statycznych). Nie sądzę aby te niedociągnięcia miały istotny wpływ na uzyskane rezultaty i konkluzje pracy, uważam jednak że nie powinny mieć miejsca w pracach naukowych. Szkoda też, że na podstawie krytycznych wartości pola elektrycznego nie oszacowano krytycznych wartości napięcia, które na podstawie moich szacunków rozmiaru cząsteczki wydają się być znacznie większe niż oczekiwane w tego typu materiałach funkcjonalnych kilka woltów (choć nie tak duże jak wynikałoby z wartości pola elektrycznego podanych w autoreferacie, które konsekwentnie zawyżono o rząd wielkości w stosunku do tych podanych w pracy H5). Podobnie jak w przypadku układów badanych w pracach H3-H4 również i w wypadku cząsteczki **DSA** okazało się, że nie jest ona najlepszym kandydatem na ferroelektryczny przełącznik molekularny z uwagi na niewielkie bariery energetyczne pomiędzy tautomerami. Nie jestem też przekonany co do możliwości zastosowania jej jako molekularnego tranzystora polowego (z uwagi na wspomniane duże wartości krytyczne pola elektrycznego). Jednak dyskutowany w pracy elektrochromizm cząsteczki **DSA** sugeruje możliwość jej potencjalnego zastosowania w czujnikach pola elektrycznego.

Podsumowując moją ocenę dorobku naukowego dr. Michała Rode, ze szczególnym uwzględnieniem osiągnięcia naukowego przedstawionego w Jego wniosku do Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów z dnia 22 marca 2019 r. o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk fizycznych w dyscyplinie fizyka, stwierdzam, że pomimo dyskutowanych w niniejszej recenzji niedostatków i drobnych uchybień stanowi ono znaczny wkład Autora w rozwój dyscypliny naukowej. W związku z powyższym, stosując się do przepisów art. 18a ust. 7 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, potwierdzam, że przedstawione mi do oceny osiągnięcia naukowe (w rozumieniu tego przepisu) dr. Michała Rode spełniają kryteria określone w art. 16 tejże ustawy i wnoszę o dopuszczenie Go do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Wrocław, 12 sierpnia 2019



Dr hab. inż. Robert W. Góra, prof. uczelni