



Dr hab. Tomasz Sowiński, prof. IF PAN
Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk
Aleja Lotników 32/46, 02-668 Warszawa
tomasz.sowinski@ifpan.edu.pl

Warszawa, 18 lipca 2019 r.

**Recenzja wniosku habilitacyjnego dra Michała Rode
pt. „Teoretyczna optymalizacja właściwości molekularnego przełącznika
protonowego sterowanego optycznie lub polem elektrycznym”**

Sylwetka kandydata

Doktor Michał Filip Rode zatrudniony jest w Instytucie Fizyki PAN od roku 2005. Najpierw był zatrudniony na stanowisku adiunkta, a po ośmiu latach (zgodnie z obowiązującymi w tamtych czasach regulacjami prawnymi) został przeniesiony na stanowisko asystenta, na którym pracuje do chwili obecnej. Doktor Rode z wykształcenia jest chemikiem. Ukończył on studia magisterskie w zakresie chemii na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego w roku 1998. Stopień naukowy doktora nauk chemicznych uzyskał w tej samej jednostce w roku 2003. Następnie odbył dwa jednoroczne staże podoktorskie w Oakland University (USA) i Stuttgart University (Niemcy). Oba pobyty odbyły się na wydziałach chemii tych jednostek.

Osiągnięcie habilitacyjne

Na osiągnięcie habilitacyjne dra Rode pt. „Teoretyczna optymalizacja właściwości molekularnego przełącznika protonowego sterowanego optycznie lub polem elektrycznym” składa się cykl pięciu publikacji. We wszystkich tych publikacjach habilitant jest pierwszym autorem, a w czterech pełnił funkcję autora korespondującego. Co warto podkreślić, cztery z tych publikacji są dwuautorskie (współautorem jest prof. Andrzej Sobolewski), a jedna trójautorska (oprócz prof. Sobolewskiego współautorką jest również dr Joanna Jankowska). Publikacje te ukazały się drukiem w latach 2008 - 2016 w bardzo dobrych czasopiśmie naukowych z listy filadelfijskiej (2 x Chem. Phys. oraz 3 x J. Chem. Phys.) i zostały szybko dostrzeżone przez środowisko naukowe. Świadczy o tym choćby fakt, że prace te są cytowane łącznie ponad 100 razy, a najlepsza z nich ponad 50. Z oświadczeń współautorów wynika, że wkład dra Rode we wszystkich tych publikacjach był dominujący i w każdym przypadku nie jest mniejszy niż 80%.

Opis osiągnięcia habilitacyjnego w autoreferacie rozpoczyna się bardzo przystępnie napisanym wstępem, który klarownie przedstawia motywację podjętych badań i prawidłowo umieszcza je w szerszym kontekście inżynierii maszyn molekularnych. We wstępie autor wyjaśnia również w sposób czytelny na czym polegała główna trudność numeryczna w otrzymaniu przedstawionych wyników — cząsteczki, którymi zajmuje się habilitant są bardzo skomplikowanymi strukturami wieloatomowymi i wieloelektronowymi, dla których

nie jest łatwo stosować standardowe metody dedykowane dla układów mniejszych. Dodatkowo, aby dobrze zrozumieć i zoptymalizować przełączniki oparte na rozważanych molekułach trzeba z bardzo dobrą dokładnością modelować nie tylko stan podstawowy tego skomplikowanego układu, ale również jego stany wzbudzone. Jest to tym bardziej istotne, gdy interesuje nas nie tylko samo rozstrzygnięcie czy dane przejście może być wykorzystane do budowy przełącznika, ale również to jaka jest charakterystyka czasowa danego procesu. To wszystko razem sprawia, że habilitant podjął się niełatwego zadania zastosowania różnych metod numerycznych w różnych sytuacjach i dokonania syntezy otrzymanych wyników w celu uzyskania jednolitego, kompleksowego i zarazem bardzo dokładnego opisu fundamentalnych procesów wymuszanych zewnętrznymi czynnikami fizycznymi.

Osiągnięcie naukowe otwiera praca [H1], w której celem jest dokładne zbadanie mechanizmu przeniesienia protonu pomiędzy dwoma podukładami: pirołu i pirydyny. Pytanie to jest bardzo ciekawe, gdyż pirol i pirydyna mogą tworzyć układ fotostabilny na dwa różne sposoby, tj. przez wiązanie międzycząsteczkowe (tworząc kompleks), albo przez wiązanie wodorowe (tworząc jedną cząsteczkę). Dr Rode w swojej pracy dokładnie analizuje stany wzbudzone w tych dwóch przypadkach w funkcji współrzędnej reakcji, tak aby możliwy był jak najbardziej efektywny proces przeniesienia protonu. W przypadku kompleksu, ze względu na zlokalizowanie elektronów walencyjnych na budujących go cząsteczkach, wzbudzenie może nastąpić na dwa sposoby — przez wzbudzenie lokalne lub przez wzbudzenie z przeniesieniem ładunku. W konsekwencji, przeniesienie protonu następuje wraz z nieadiabatycznym przejściem pomiędzy tymi stanami wzbudzonymi. Proces ten wymaga pokonania pewnej niezerowej bariery potencjału. W przypadku cząsteczkowym odpowiednie orbitale są zdelokalizowane pomiędzy oba podukłady i tym samym (przynajmniej w pierwszym przybliżeniu) przeniesienie protonu może odbyć się bez konieczności pokonywania dodatkowej bariery energetycznej. Jak wykazano w pracy [H1] nie jest to jednak w pełni dobry opis ze względu na możliwy dodatkowy wzajemny obrót podukładów. Dokładna analiza pokazuje, że może to prowadzić do pojawienia się dodatkowej bariery, która silnie zależy od rzędu wiązania.

Praca [H1] pokazała jasno, że kluczowym elementem umożliwiającym zaproponowanie danej cząsteczki jako przełącznika opartego na przeniesieniu protonu jest istnienie odpowiednich profili energetycznych w stanach podstawowym i wzbudzonych. Dlatego w pracy [H2] habilitant bada jaki wpływ na te profile (zarówno w stanie podstawowym jak i w stanach wzbudzonych) ma efekt podstawnikowy, tzn. próbuje rozstrzygnąć jak kontrolowana modyfikacja struktury chemicznej cząsteczki wpływa na proces przeniesienia. Oczywiście zasadniczym celem jest zbadanie czy można kontrolować wysokości bariery energetycznej na przeniesienie, a być może nawet całkowicie ją znieść. Analiza przeprowadzona w tej pracy okazała się dość fundamentalna i stała się motywacją do wielu dalszych badań (praca jest cytowana ponad 50 razy). Jest to zatem praca, która ma istotny wpływ na rozwój dziedziny.

W pracach [H1] i [H2] przeniesienie protonu jest stymulowane wzajemnym skręceniem podukładów. Choć efekt ten jest dość spektakularny i ciekawy to (jak argumentuje habilitant) ma swoje wady wynikające głównie ze zbyt długiego czasu tego procesu. Okazuje się, że zasadniczym elementem wpływającym na wydłużenie czasu jest przede wszystkim proces wzajemnego skręcenia podukładów, który jest dużo dłuższy od charakterystycznego czasu potrzebnego na samo przeniesienie protonu. Dlatego w pracach [H3] i [H4] dr Rode koncentruje się wokół innego pomysłu na zrealizowanie fotoprzełącznika molekularnego, który nie wymaga wzajemnego skręcenia, a tym samym (przynajmniej teoretycznie) pozwala znacznie skrócić czas całego przełączania. W proponowanym schemacie, zamiast obrotu i przeniesienia jednego protonu, dochodzi do przeniesienia dwóch protonów w trakcie przełączania. Oczywiście ten ciekawy i w swojej istocie dość prosty pomysł nie jest możliwy do natychmiastowego zrealizowania, gdyż wymaga numerycznego modelowania takiej modyfikacji struktury cząsteczki, aby w końcowym efekcie miała ona porządane własności fotoprzełącznika. W tym celu habilitant bada m.in. efekt podstawnikowy oraz efekt zwiększenia rozmiaru szkieletu cząsteczki.

Zupełnie inny pomysł na przełącznik molekularny został zaproponowany w pracy [H5]. Jest on oparty o spostrzeżenie, że dwuprotonowe przeniesienie w dość skomplikowanej cząsteczce DSA, które było dokładnie zbadane w pracy [H3] dla cząsteczki 3HPA, może istotnie zależeć od przyłożonego zewnętrznego pola elektrycznego. W sytuacji bez przyłożonego pola, dwuprotonowe przeniesienie jest w istocie procesem sekwencyjnym, gdyż bariera na przeniesienie dwóch protonów równocześnie jest zbyt duża. Jednak dzięki przyłożonemu zewnętrznemu polu elektrycznemu można tę barierę obniżyć i w konsekwencji, jeśli tylko zewnętrzne pole elektryczne jest odpowiednio silne, może nastąpić bezbarierowe równoczesne przeniesienie dwóch protonów.

Cykl pięciu publikacji [H1]-[H5] stanowi w mojej ocenie jednotematyczny cykl dobrze powiązanych ze sobą publikacji. Habilitant, wychodząc od dobrej motywacji do podjęcia badań, przechodzi przez kolejne etapy w sposób logicznie powiązany. Tym samym na końcu otrzymuje dość spójny i wyczerpujący opis fotoprzełączników opartych o zjawisko przeniesienia protonu. Wybór akurat tych pięciu publikacji uznaję za bardzo celny i dobrze umotywowany. W mojej ocenie wybrany cykl publikacji spełnia warunki merytoryczne, a także formalne stawiane osiągnięciom habilitacyjnym.

Przynależność osiągnięcia do dziedziny i dyscypliny naukowej

Na zakończenie oceny osiągnięcia habilitacyjnego recenzent staje przed dodatkowym problemem rozstrzygnięcia czy jest ono osiągnięciem w dziedzinie i dyscyplinie naukowej wskazanej we wniosku, tj. w dziedzinie nauk fizycznych w zakresie fizyki. Przedstawione osiągnięcie jest bowiem bardzo interdyscyplinarne i tematycznie bardzo szeroko zahacza o chemię, fizykę, a także nanotechnologię. Jest to tym bardziej istotne, że w swoich pracach dr Rode, jako wysoko wykształcony i wykwalifikowany chemik teoretyk, wykorzystuje wprost metody teoretyczne chemii kwantowej do opisu własności dość skomplikowanych

cząsteczek chemicznych, o których słyszał mało który fizyk. Sama metodologia dochodzenia do uzyskanych wyników też jest zapewne bliższa chemii niż fizyce. W mojej ocenie jednak te elementy, świadczące o chemicznej specyfikacji osiągnięcia, są drugorzędne. Najważniejszym bowiem elementem wskazanego osiągnięcia habilitacyjnego jest próba dogłębnego zrozumienia podstawowych procesów fizycznych zachodzących w badanych cząsteczkach, ich elementarnych własności i możliwych sposobów ich kontrolowania za pomocą czynników fizycznych. Celem nadrzędnym jest zaproponowanie konkretnych cząsteczek jako bardzo wydajnych i dobrze kontrolowanych dwustanowych przełączników molekularnych. W mojej ocenie nie ma żadnej wątpliwości, że przedłożone osiągnięcie habilitacyjne, choć bardzo interdyscyplinarne, może być bez przeszkód zaliczone do osiągnięć w ramach nauk fizycznych i tym samym może być podstawą do ubiegania się o awans naukowy w ich zakresie.

Pozostała działalność naukowa

Na pozostałą działalność naukową dra Rode składają się głównie inne publikacje naukowe, tj. ponad 25 różnego rodzaju artykułów naukowych opublikowanych po uzyskaniu stopnia naukowego doktora i niewchodzących w skład osiągnięcia habilitacyjnego. Wszystkie oryginalne wyniki zostały opublikowane w dobrych ($IF > 1.5$) lub bardzo dobrych ($IF > 3$) czasopismach naukowych, część na skutek bardzo dobrze rozwiniętej i aktywnie działającej sieci współpracowników międzynarodowych. Co ważne, jedynie część z tych prac tematycznie jest bardzo zbliżona do tematyki osiągnięcia habilitacyjnego. W dużej przewadze te dodatkowe prace dotyczą innych zagadnień związanych z fotofizyką różnych cząsteczek chemicznych. Świadczy to o dość szerokich zainteresowaniach naukowych habilitanta.

Habilitant brał udział w kilkunastu konferencjach międzynarodowych, na których głównie prezentował plakaty. Jedynie na pięciu konferencjach (organizowanych w Polsce) wygłosił referat. Nie jest to na pewno wynik imponujący. Zdecydowanym cieniem na działalności reklamującej działalność naukową habilitanta kładzie się bardzo mała aktywność seminaryjna. Jak wynika z autoreferatu, od roku 2005 dr Rode wygłosił siedem wykładów seminaryjnych w jednostkach naukowych, przy czym w latach 2010-2018 nie miał żadnego wystąpienia. To oznacza, że prace wchodzące w osiągnięcie habilitacyjne w zasadzie nie były przedmiotem jakichkolwiek roboczych dyskusji naukowych z innymi naukowcami. To może również oznaczać, że ciężar skutecznego rozgłaszania uzyskanych wyników ciążył głównie na prof. Sobolewskim, który jest światowej sławy naukowcem w tej tematyce.

W autoreferacie znajduje się informacja o jednym wyróżnieniu za działalność naukową (nagrodę poetycką pomijam). Było to wyróżnienie za prezentację plakatową na konferencji o zasięgu krajowym. Nie należy zatem postrzegać tego wyróżnienia jako dużego osiągnięcia.

Działalność organizacyjna

Działalność organizacyjna habilitanta po uzyskaniu stopnia doktora jest w mojej ocenie najsłabszą częścią wniosku. Choć habilitant był wykonawcą w kilku projektach naukowych

finansowanych przez NCN i NCBiR, to nigdy nie był kierownikiem takiego typu projektu. Habilitant ma więc niewielkie doświadczenie w bezpośrednim zarządzaniu badaniami naukowymi finansowanymi ze środków publicznych. Pewnym plusem jest oczywiście fakt, że dr Rode kierował projektem numerycznym w ICM UW. Niemniej jednak, zdobycie takiego grantu jest stosunkowo łatwe i nie powinno być postrzegane jako duże osiągnięcie. W dodatku nie jest to projekt, który wymaga zarządzania ludźmi, a przede wszystkim środkami finansowymi. Na postrzeganie habilitanta pozytywnie wpływa to, że był on dwukrotnie członkiem komitetu organizacyjnego konferencji „Molecules and Light” organizowanej regularnie w Polsce, a także sporządził kilkanaście recenzji artykułów w różnych czasopismach naukowych.

Działalność dydaktyczna

Opisana w referacie działalność dydaktyczna habilitanta po uzyskaniu pierwszego stopnia naukowego również nie jest najsilniejszą stroną wniosku habilitacyjnego. Tutaj pewnym usprawiedliwieniem może być fakt, że dr Rode jest zatrudniony w jednostce, która nie prowadzi studiów magisterskich i w związku z tym możliwości prowadzenia zajęć dla studentów jest bardzo ograniczona. Wciąż istnieje jednak możliwość pracy z doktorantami, a także działalność popularnonaukowa, która jest silnie wspierana w IF PAN. Te możliwości nie są jednak wykorzystywane przez habilitanta zbyt intensywnie. Z autoreferatu wynika, że habilitant sprawował (niestety nieformalnie) opiekę naukową nad pracą dwojga doktorantów. Jedynym śladem tej opieki są wspólne publikacje. Nie jest jasne dlaczego nie był promotorem pomocniczym w tych przewodach. Podobnie jest w przypadku opieki nad dwiema magistrantkami, które mają wspólne prace z dr Rode, ale nie był on ich formalnym promotorem.

Bardzo pozytywną częścią aktywności dydaktycznej habilitanta są prowadzone przez niego krótkoterminowe szkolenia z użytkowania programu do obliczeń kwantowo-mechanicznych TURBOMOL. W sumie przeszkolił on kilkoro studentów i doktorantów z różnych uczelni i instytutów. Ta działalność pokazuje, że habilitant chętnie dzieli się swoją ekspercką wiedzą z młodszymi kolegami. Wielka szkoda, że nie przekuł on tych szkoleń w regularną semestralną pracownię dla zainteresowanych magistrantów i doktorantów. Takie zajęcia, jeśli tylko dobrze zaplanowane i przygotowane, mogłyby być szczególnie rozwijające, nawet dla studentów innych specjalności.

Wskaźniki bibliometryczne

Dr Rode opublikował 33 publikacje w czasopismach z listy filadelfijskiej z czego 28 już po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Jest również autorem jednego rozdziału w książce z serii Springer Proceedings in Physics oraz dwóch artykułów pokonferencyjnych. Do chwili obecnej (wg bazy Web Of Science) jego prace były cytowane ponad 580 razy bez autocytowań, a jego indeks Hirsha jest równy 14. Od roku 2013 prace habilitanta są regularnie cytowane i utrzymuje się to na poziomie ponad 50 cytowań rocznie. Niewiele mówiący sumaryczny współczynnik wpływu opublikowanych prac, którego podanie

wymagane jest przepisami wynosi 101,364. Biorąc nawet pod uwagę fakt, że dr Rode uzyskał stopień naukowy doktora 15 lat temu, należy uznać te wskaźniki jako bardzo dobre, świadczące o dużej rozpoznawalności prac habilitanta w środowisku naukowym. Część tego sukcesu zapewne związana jest ze światową renomą prof. Sobolewskiego, w którego grupie pracuje dr Rode. W każdym razie, parametry bibliometryczne dra Michała Rode są na pewno w zupełności wystarczające w przypadku osób ubiegających się o uzyskanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w zakresie fizyki teoretycznej.

Podsumowanie

Przedłożony wniosek habilitacyjny dra Michała Rode zawiera dobrze skonstruowany i jasno opisany jednotematyczny cykl publikacji składający się na oryginalne osiągnięcie naukowe habilitanta. Idąc za literą prawa, bez żadnych wątpliwości stwierdzam, że jest to w istocie „osiągnięcie naukowe stanowiące znaczny wkład autora w rozwój określonej dyscypliny naukowej” i w związku z tym spełniony jest najważniejszy warunek formalny jaki musi spełniać wniosek habilitacyjny. Wraz z dodatkową działalnością naukową udokumentowaną wieloma, dobrze cytowanymi publikacjami stanowi wystarczającą podstawę do ubiegania się o uzyskanie stopnia naukowego dra habilitowanego w zakresie fizyki. Pewien niedosyt pozostawia mała aktywność organizacyjna i przeciętna działalność dydaktyczna habilitanta. Choć aktywności te nie są najważniejsze przy ocenie wniosków habilitacyjnych, to są one zwyczajowo traktowane jako te wątki pracy naukowej, które pozwalają ocenić samodzielność naukową oraz aktywność w organizowaniu i koordynowaniu pracy następnych pokoleń naukowców.

Biorąc pod uwagę ocenę wszystkich wymienionych powyżej elementów wniosku habilitacyjnego dra Michała Rode uważam, że przedłożone osiągnięcie habilitacyjne wraz z pozostałą działalnością naukową, dydaktyczną i organizacyjną wypełniają zarówno formalne jak i zwyczajowe wymagania stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk fizycznych. W związku z tym popieram wniosek o nadanie drowi Michałowi Filipowi Rode stopnia naukowego doktora habilitowanego.

