

Prof. dr hab. Artur Michalak
Zakład Chemii Teoretycznej
Wydział Chemii
Uniwersytet Jagielloński
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
tel. +48-12-686-2381
fax. +48-12-686-2750
e-mail: michalak@chemia.uj.edu.pl



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Kraków, 11 lipca 2019 r.

Wydział Chemii

**Ocena dorobku naukowego dr. Michała Filipa Rode
oraz jego osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę
przewodu habilitacyjnego, przedstawionego pod tytułem
*„Teoretyczna optymalizacja właściwości molekularnego przełącznika
protonowego sterowanego optycznie lub polem elektrycznym”***

Dr Michał Filip Rode ukończył studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego w 1998 r., uzyskując dyplom magistra chemii, promotorem pracy magisterskiej była prof. dr hab. Joanna Sadlej. Studia doktoranckie Habilitant odbywał także na Wydziale Chemii UW; w 2003 r. obronił pracę doktorską, zatytułowaną *„Struktura i widma w podczerwieni słabo związanych klastrów molekularnych”*, przygotowaną pod promotorską opieką prof. dr hab. Joanna Sadlej.

Po doktoracie, w 2001 r., dr Michał F. Rode odbył **trzymiesięczny staż w grupie prof. Jerzego Leszczyńskiego** w Jackson State University, a następnie **dwa długoterminowe staże post-doktorskie** w Oakland University, Department of Chemistry (USA) **w grupie prof. Małgorzaty M. Szczęśniak** (2003-2004) oraz Stuttgart University, Faculty of Chemistry, **w grupie prof. Hansa-Joachima Wernera** (2004-2005). **Przebieg kariery Habilitanta w kontekście staży zagranicznych należy uznać za wzorcowy.**

Po powrocie do kraju Habilitant został zatrudniony jako adiunkt w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie (2005-2013); aktualnie zatrudniony jest jako asystent (od 2013 r.) w tym Instytucie.

ul. Gronostajowa 2

30-387 Kraków

tel. +48 12 686 26 00

fax +48 12 686 27 50

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

Rozprawę habilitacyjną dr. Michała F. Rode stanowi 5 oryginalnych publikacji opatrzonych 44-stronicowym komentarzem. Autor zatytułował swoje osiągnięcie habilitacyjne jako „*Teoretyczna optymalizacja właściwości molekularnego przełącznika protonowego sterowanego optycznie lub polem elektrycznym*”. Prace stanowiące podstawę osiągnięcia habilitacyjnego opublikowane zostały w latach 2008-2016; habilitacja w takim kształcie mogła zatem zostać złożona już trzy lata wcześniej. Prace cyklu habilitacyjnego opublikowane zostały w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym, dwie prace w *J. Chem. Phys.*, dwie w *Chem. Phys* oraz jedna w *J. Phys. Chem. A*. Wszystkie prace powstały z udziałem Habilitanta oraz prof. Andrzeja L. Sobolewskiego, w jednej dodatkowo współautorką jest dr Joanna Jankowska. Przedłożona dokumentacja zawiera oświadczenia Habilitanta oraz współautorów dotyczące ich wkładu w prace cyklu habilitacyjnego. Z przedłożonych oświadczeń jasno wynika dominujący wkład dr. Michała F. Rode; prof. Andrzej Sobolewski szacuje swój wkład na 10-20 %, a dr Joanna Jankowska na 10%. Zgodnie z oświadczeniami wszystkie badania Habilitant przeprowadził oraz wstępnie opracował samodzielnie. **Uważam, że w tym aspekcie habilitację dr. Michała F. Rode można także uznać za wzorcową.** Warto dodać, że w przypadku 4 publikacji jest on autorem korespondencyjnym.

W tym miejscu także należy podkreślić, że **pozornie** skromny ilościowo cykl habilitacyjny (5 publikacji) jest wynikiem świadomej decyzji Autora. Lektura *Autoreferatu* oraz analiza dorobku naukowego Habilitanta pokazuje, że zdecydował się on włączyć do cyklu habilitacyjnego jedynie te prace w których jego udział jest zdecydowanie dominujący, choć z powodzeniem mógłby dołączyć jeszcze kilka prac związanych ściśle z tematyką cyklu habilitacyjnego (spośród prac P1-P8), w szczególności prace, w których jego przewidywania teoretyczne zostały potwierdzone doświadczalnie. W mojej opinii, fakt ten zdecydowanie zwiększa wagę habilitacji dr. Michała F. Rode.

Tematyka przedstawionej rozprawy habilitacyjnej dr. Michała F. Rode dotyczy teoretycznego modelowania molekularnych przełączników optycznych opartych na procesie przeniesienia protonu w stanie wzbudzonym (EISPT, *Excited-State Intramolecular Proton Transfer*), w oparciu o zaawansowane metody kwantowo-chemiczne. Prace Habilitanta ukierunkowane były na szczegółowe określenie mechanizmu fotofizycznego przełączania oraz na szczegółowym określeniu relacji pomiędzy strukturą a własnościami fotofizycznymi badanych układów. Systematyczne modyfikacje struktury badanych cząsteczek pozwoliły na optymalizację ich właściwości.

Punktem wyjścia Habilitanta jest praca H1 (*Chem. Phys.* 2008), w której wytłumaczone zostało zjawisko podwójnej emisji w cząsteczce 2-(2'-pirydylo)-pirolu. W pracy tej przeanalizowane i porównane są mechanizmy wewnątrzcząsteczkowego

przeniesienia protonu we wspomnianej cząsteczce oraz międzycząsteczkowego przeniesienia protonu w „pokrewnym” kompleksie pirolu z pirydyną. Ważnym wynikiem pracy **H1** jest także pokazanie, że można powiązać kształt powierzchni energii potencjalnej stanu wzbudzonego (występowania i wysokość bariery energetycznej) z krotnością wiązania, wokół którego dokonywany jest obrót.

Praca **H2** (*J. Phys. Chem. A*, 2010) dotyczy mechanizmu działania fotoprzełącznika ESIPT wspomaganego skręceniem tzw. dźwigu protonowego. W pracy przebadano serię układów należących do nowej klasy fotoprzełączników TPT (*Twist-assisted EISPT*) o systematycznie modyfikowanej strukturze, co pozwoliło na określenie efektu podstawnikowego. Przewidywania teoretyczne Habilitanta zostały potwierdzone doświadczalnie w pracy **P2** (*ChemPhysChem*, 2009).

Prace **H3** (*Chem. Phys.* 2012) oraz **H4** (*J. Chem. Phys.* 2014) dotyczą mechanizmu działania fotoprzełączników opartych na procesie podwójnego przeniesienia protonu w stanie wzbudzonym przy udziale transmitera protonu. Głównym obiektem badań w tych pracach jest cząsteczka kwasu 3-hydroksy pikolinowego oraz jej pochodne, w których systematycznie modyfikowano podstawniki. Celem było znalezienie struktury wykazującej cechy fotoprzełącznika opartego na procesie podwójnego przeniesienia protonu, a także szczegółowe określenie efektu podstawnikowego.

Ostatnia praca cyklu, **H5** (*J. Chem. Phys.* 2016), dotyczy modelu molekularnego przełącznika ferroelektrycznego, którego mechanizm przełączania kontrolowany jest kierunkiem przyłożonego zewnętrznego pola elektrycznego. Ważnym wynikiem pracy jest m.in. pokazanie, że mechanizm podwójnego przeniesienia protonu (dwu- lub jednoetapowy) zależy od przyłożonego pola elektrycznego.

O znaczeniu osiągnięcia habilitacyjnego dr. Michała F. Rode świadczy m.in. odbiór jego prac przez środowisko naukowe, odzwierciedlony liczbą cytowań. Publikacje stanowiące podstawę habilitacji cytowane były już ponad 100 razy. Najbardziej cytowanymi są prace H2 (51 cytowań) oraz H1 (25 cytowań).

Podsumowany w dokumentacji całkowity dorobek naukowy dr. Michała F. Rode obejmuje 33 publikacje naukowe w czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej (łączna wartość IF>101) oraz rozdział w książce; 28 prac opublikowanych zostało po uzyskaniu stopnie doktora. Badania Habilitanta po doktoracie dotyczyły wielu, różnych zagadnień nie związanych z tematyką habilitacji, m.in. słabych oddziaływań atomów metali przejściowych lub ich kationów z atomem helu; teoretycznego opisu centrum aktywnego barwnika hemocyjaniny, mechanizmów wygaszania fluorescencji w kilku różnych układach, a także opisu relacji pomiędzy strukturą a właściwościami cząsteczek w kierunku projektowania

układów o pożądanych własnościach. Kilka prac Habilitanta powstało we współpracy z zespołami eksperymentalnymi. **Wyniki badań naukowych** prowadzonych przez **dr. Michała F. Rode znajdują oddźwięk w literaturze**, czego wymiernym dowodem jest znaczna, na tym etapie kariery, liczba cytowań wynosząca **648 cytowań** (581 bez autocytowań) oraz wartość indeksu Hirscha $h = 13$. **Aktywność naukową dr. Michała F. Rode po doktoracie, poza pracami cyklu habilitacyjnego, oceniam zatem jako istotną oraz wnoszącą wkład do nauki.**

Dr Michał F. Rode wielokrotnie prezentował wyniki swoich badań naukowych na międzynarodowych i krajowych konferencjach i sympozjach naukowych. **W dokumentacji wymienionych jest 20 prezentacji, obejmujących zarówno prezentacje posterowe (15; jeden poster wyróżniony) , jak i wystąpienia ustne (5), w tym 4 wykłady na zaproszenie.**

Habilitant był po doktoracie wykonawcą kilku projektów kierowanych przez prof. A. L. Sobolewskiego (m.in. NCN Harmonia, NCN Maestro), dr. hab. J. Karpiuka (NCBiR) oraz dr. hab. G. Burdzinskiego (NCN Opus); nie kierował własnym projektem.

Wyrazem rozpoznawalności Habilitanta jako naukowca są także zaproszenia do wykonywania recenzji dla renomowanych międzynarodowych czasopism naukowych (w dokumentacji wymienionych jest 11 recenzji w są. *Journal of Chemical Physics*, *Chemical Physics Letters*, *Spectrochimica Acta A*, *Journal of Photochemistry and Photobiology A*, *Journal of Molecular Structure*, *Journal of Structural Chemistry*, *Journal of Molecular Structure*, *Acta Physica Polonica*).

Przebieg kariery naukowej dr. Michała F. Rode, staże podoktorskie oraz zatrudnienie w instytucie PAN, a nie w uczelni, spowodowały, że Habilitant nie może się poszczycić bogatym dorobkiem dydaktycznym obejmujących prowadzenie zajęć kursowych dla studentów. Regularne zajęcia dydaktyczne prowadził on jedynie w okresie studiów doktoranckich na Wydziale Chemii UW. **W perspektywie habilitacji, u progu pełnej samodzielności oraz sprawowania opieki nad pracami doktorskimi, najistotniejsze są osiągnięcia w zakresie kształcenia młodej kadry. W tym zakresie, Habilitant co prawda nie ma sformalizowanego udziału w przewodach doktorskich, sprawował jednak częściową pomocniczą opiekę nad dwójką doktorantów, a także prowadził krótkie warsztaty szkoleniowe dla kilku innych osób. Wcześniej Habilitant opiekował się także częściowo dwiema studentkami, z którymi opublikował dwie prace.**

W zakresie organizacyjnym Habilitant wymienia udział w organizacji dwóch konferencji cyklu *Molecules and Light*, w 2015 i 2017 r.

Podsumowując, uważam, że przedstawiony jako podstawa przewodu habilitacyjnego spójny tematycznie cykl 5 prac dr. Michała F. Rode stanowi znaczący wkład w rozwój dyscypliny. Podobnie należy ocenić jego inne prace opublikowane po doktoracie, które nie zostały umieszczone w cyklu habilitacyjnym. Już w chwili obecnej Habilitant należy do rozpoznawalnych naukowców w reprezentowanej specjalności naukowej, o czym świadczy m.in. oddźwięk jego prac wyrażony dużą liczbą cytowań oraz fakt zaproszeń do wykonania recenzji artykułów naukowych.

Uważam również, że przedstawione jako podstawa przewodu habilitacyjnego osiągnięcie naukowe dr. Michała F. Rode oraz jego aktywność naukowa, potwierdzona dorobkiem naukowym poza wymienionym osiągnięciem, spełniają wymagania określone w *Ustawie z dnia 14 marca 2003 r o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki*. W związku z powyższym uważam, że nadanie panu dr. Michałowi F. Rode stopnia doktora habilitowanego jest w pełni uzasadnione.



Prof. dr hab. Artur Michalak