



INSTYTUT CHEMII ORGANICZNEJ

POLSKIEJ AKADEMII NAUK

Prof. dr hab. Daniel T. Gryko
Kierownik zespołu 10

01-224 Warszawa
ul. Kasprzaka 44/52
Tel. (22) 3432036
Fax.: (22) 632 66 81
E-mail: daniel@icho.edu.pl

Warszawa 20-10-2013

Ocena rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego dr Joanny Nowickiej Scheibe

Pani Joanna Nowicka-Scheibe ukończyła studia wyższe na Politechnice Szczecińskiej w roku 1981. W 1988 roku, pracując z prof. Eugeniuszem Grechem rozpoczęła współpracę z zespołem kierowanym przez prof. L. Sobczyka dotyczącą wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego. W 1996 roku uzyskała stopień doktora nauk chemicznych na podstawie rozprawy pt. „Synteza i właściwości kompleksów z wewnątrzcząsteczkowym wiązaniem wodorowym (NHN)⁺ i (NHN)⁻” (promotor - prof. Eugeniusz Grech). Nie odbyła tzw. stażu doktorskiego. W następnych latach pracowała pod kierunkiem prof. L. Sobczyka zajmując się początkowo sulfonamidami jako C-H kwasami, a następnie nad kompleksami z przeniesieniem ładunku (*ang.* ‘charge-transfer’, CT). W tym czasie (lata 2001-2007) odbyła kilka krótkoterminowych staży w Rosji i w Niemczech związanych z pomiarami zaawansowanymi metodami fizykochemicznymi.

Od roku 1981, nieprzerwanie Pani Joanna Nowicka-Scheibe jest pracownikiem Zachodniopomorskiego Uniwersytetu Technologicznego w Szczecinie (obecnie na stanowisku adiunkta).

Zainteresowania i aktywność naukowa dr Joanny Nowickiej-Scheibe dotyczyły różnych aspektów chemii organicznej i strukturalnej. Jej początki to badania wiązań wodorowych, które ewoluowały w kierunku kompleksów z przeniesieniem ładunku.

Pomimo dostarczenia dużej liczby oświadczeń o współautorstwie, ze względu na dużą liczbę autorów we wszystkich opublikowanych artykułach, trudno jednoznacznie określić, od którego momentu możemy mówić o badaniach samodzielnych. W jakimś stopniu

problematyka dr Nowickiej-Scheibe dotyczy optyki nieliniowej. Problematyka ta jest niezwykle aktualna. Szeroko pojmowana optyka nieliniowa ma coraz większy wpływ na nasze życie i rozwija się nieprzerwanie od wielu lat. Główne kierunki rozwoju tej tematyki to: modyfikacja struktury w kierunku uzyskania związków o większych współczynnikach nieliniowych (np. pierwsza hiperpolaryzowalność, druga hiperpolaryzowalność, przekrój czynny na absorpcję dwufotonową) oraz zastosowania związane z medycyną, blokowaniem optycznym itp.

Praca habilitacyjna Kandydatki składa się z 14-stu publikacji opublikowanych w latach 2003-2013. Prace te wraz z przedstawionym na 40-stu stronach autoreferatem stanowią przedłożoną rozprawę habilitacyjną. Współautorami tych publikacji jest duża liczba naukowców pracujących obecnie w Polsce i poza jej granicami. Wszyscy oni dostarczyli wymagane oświadczenia.

Rozprawa habilitacyjna pani dr Joanny Nowickiej-Scheibe dotyczy związków chemicznych o potencjalnych nieliniowych właściwościach optycznych. Łącznie zostało otrzymanych zaledwie kilkanaście związków, które następnie były badane pod kątem ich struktury. Substancje te były produktami prostych jednoetapowych syntez w dwóch wariantach: a) kondensacji 1,2-diketonów z *orto*-aminofenolami oraz; b) tworzenie kompleksów z przeniesieniem ładunku pomiędzy bogatymi w elektrony związkami aromatycznymi a ubogimi w elektrony pochodnymi typu tetracyjanoetyleny. Publikacje H-1, H-2, H-3, H-4 oraz H-5 opierają się na reakcjach *orto*-aminofenoli z 1,2-diketonami znanej od wielu lat. W niektórych przypadkach autorka zaobserwowała bardzo nietypowy przebieg reakcji prowadzący np. w przypadku kamfory do niespodziewanego związku o pierścieniu pięciocłonowym (H-4, H-5). Wynik tej choć sam w sobie ciekawy niewiele jednak wnosi do optyki nieliniowej.

Również późniejsze kompleksy z przeniesieniem ładunku (CT) nie mają w sobie elementu nowości. Połączenia typu CT różnych węglowodorów aromatycznych z tetracyjanochinodimetanem oraz z tetracyjanoetylenem było wielokrotnie eksploatowane przez innych autorów.

Podsumowując z całym naciskiem chciałem podkreślić, że od strony syntetycznej recenzowana praca habilitacyjna jest nie do obrony. Zawiera ona proste, od lat znane syntezy wzbogacone o niewiele wnoszące modyfikacje podstawników. W każdym wypadku używane są standardowe, niezmienione procedury. Można więc powiedzieć, że związki chemiczne zaprojektowane przez Kandydatkę nieco odstają od współczesnych standardów światowych.

Drugim elementem analizowanej pracy habilitacyjnej jest cel ich syntezy czyli struktura i właściwości. Również i tym punkcie zastrzeżeń jest bardzo dużo. Autorka słusznie zauważa, że niecentrosymetryczność kryształów jest warunkiem niezbędnym by takie materiały miały szanse na znaczące makroskopowe współczynniki nieliniowe. Autorka jednak nie dodała, że nie mniej ważnym warunkiem jest znacząca pierwsza hiperpolaryzowalność (β) na poziomie cząsteczki. Opisywane przez nią benzoksazyno-benzoksazyny nie mają żadnych szans na dużą wartość β ponieważ albo nie mają struktury typu donor-akceptor lub też ich układ sprzężonych wiązań podwójnych/pierścieni aromatycznych jest zbyt mały. Proste pochodne benzenu (a benzoksazyno-benzoksazyny formalnie takimi są) były badane pod tym kątem już wiele lat temu. Kluczowym związkiem w badaniach nad nieliniowymi właściwościami optycznymi związków organicznych była przez wiele lat *para*-nitroanilina. Podany przez kandydatkę 17,21-dinitro-(3,4,8,9)-dibenzo-2,7-dioxa-5,10-diaza[4.4.4]propellan jest prostym analogiem tego klasycznego związku. Obserwacja, że substancja ta krystalizuje w niecentrosymetrycznej grupie przestrzennej jest cenna, ale nie zmienia faktu, że jej nieliniowe właściwości na poziomie cząsteczkowym nie powinny znacząco odbiegać od *para*-nitroaniliny czy też 2-amino-5-nitrofenolu. Co więcej dr Nowicka-Scheibe nie zbadała właściwości nieliniowych swojego związku (np. pierwsza hiperpolaryzowalność, generowanie drugiej harmonicznej), pomimo tego że od syntezy upłynęło dziesięć lat (artykuł H-1 z 2003 roku).

Trudno nie zgodzić się a dr Nowicką-Scheibe, że obserwacja dynamiki grup metyloowych w kryształach metodą nieelastycznego rozpraszania neutronów, dostarcza mnóstwo informacji na temat oddziaływań z przeniesieniem ładunku (CT). Kandydatka zbadała około dziesięciu takich kompleksów. Z badań tych jednak trudno wyciągnąć jakieś uogólnione wnioski lub/i wskazówki dotyczące projektowania następnych kompleksów CT o lepszych właściwościach. Również i w tym przypadku nie wykonano badań dotyczących nieliniowych właściwości optycznych.

Innym problemem jest brak porównania uzyskanych wyników z wynikami uzyskanymi przez innych autorów, dotyczących związków analogicznych strukturalnie lub materiałów o pewnych właściwościach. Z autoreferatu trudno się zorientować czy kompleksy CT badane przez Kandydatkę (z heksametylobenzenem, dimetylopirazynami, kwasem kwadratowym etc.) wyróżniały się jakąś korzystną cechą.

Moim zdaniem zbiór czternastu przedstawionych prac nie wykazuje zdolności autorki do samodzielnego wskazania kierunku badawczego. Autorka również nie zademonstrowała

umiejętności pozyskiwania pieniędzy (tzn. uczestniczyła w realizacji grantów, ale tylko jako wykonawca).

Oceniając całkowity dorobek naukowy stwierdzam, że jest on akceptowalnej wielkości a stanowi go 45 prac z tzw. Listy Filadelfijskiej. Prace oryginalne były cytowane łącznie 329 razy, co biorąc pod uwagę upływ czasu (od opublikowanie pierwsze z nich upłynęło 24 lata) trudno uznać za rewelacyjny wynik. Prace wchodzące w skład przedstawionej mi do recenzji rozprawy habilitacyjnej nie są praktycznie w ogóle cytowane. Pozornym wyjątkiem są dwie prace (np. *Chemical Physics*, 2006, 327, 311-318 [7 cytowań] oraz *Polish Journal of Chemistry*, 2007, 81, 643-652 [9 cytowań]). Bliższa analiza wykazuje jednak, że są to autocytowania lub cytowania pochodzące z zakładu kierowanego przez prof. L. Sobczyka (współautora tych artykułów).

Dorobek dydaktyczny dr Joanny Nowickiej-Scheibe nie budzi żadnych zastrzeżeń. Prowadzi ona różnorodne zajęcia ze studentami. Do chwili obecnej Kandydat sprawował opiekę nad około 50 pracami magisterskimi.

Biorąc pod uwagę wszystkie wymienione aspekty recenzowanej pracy habilitacyjnej (a w szczególności minimalny wpływ na badania prowadzone przez innych naukowców, małą kreatywność oraz brak jasno zarysowanej tematyki badawczej) stwierdzam jednoznacznie, że nie można dowieść znacznego wkładu autora w rozwój dyscypliny naukowej. Nie spełnione zostały zatem wymogi ustawy określone w art. 26 Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym (Dz. U. Nr 65 z 2003 roku), i na tej podstawie wnoszę o niedopuszczenie dr Joanny Nowickiej-Scheibe do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Z poważaniem

