



dr hab. inż. Zygmunt Flisak, prof. UO
tel.: 77-452-7141
e-mail: zgf@uni.opole.pl

Opole, 17 marca 2020 r.

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr. Klemensa Nogi pt. „Badanie oddziaływań elektronowych w związkach molibdenu o mieszanej walencyjności metodami chemii kwantowej”

Wstęp

Pojęcie stopnia utlenienia jako narzędzia do prowadzenia „księgowości elektronowej” (termin ukuty przez Wolfganga Kaima w pracy *Eur. J. Inorg. Chem.* 2012, 343) jest atrakcyjnym obiektem w poznaniu chemii, a stosowane od kilku dekad metody funkcjonalu gęstości oferują możliwość analizy układów metaloorganicznych o różnym stopniu osobliwości. Rozwiązując oryginalny problem naukowy poprzez wyjaśnienie spostrzeżeń eksperymentalnych na drodze teoretycznej, Klemens Noga umiejętnie łączy te dwie płaszczyzny.

Struktura dysertacji

Rozprawa Klemensa Nogi ma postać klasyczną i liczy 108 stron. Po nakreśleniu celu pracy, Autor przechodzi do osiemnastostronicowego wstępu, gdzie omawia klasyfikację związków o mieszanej wartościowości i opisuje właściwości tych związków oraz metody eksperymentalne stosowane do ich badania. W lakonicznym opisie metod obliczeniowych Autor umiejętnie ustrzegł się często spotykanego w tym miejscu mało twórczego parafrazowania treści podręczników do chemii kwantowej, zwłaszcza że korzystał ze standardowych metod chemii obliczeniowej dostępnych w komercyjnych pakietach oprogramowania. Taka zwięzłość jest w moim przekonaniu jedną z istotnych zalet recenzowanej rozprawy.

Zasadniczą część pracy stanowią kolejne dwa rozdziały, w której przedstawiono wyniki obliczeń dotyczących struktury i oddziaływań elektronowych w dwurdzeniowych kompleksach molibdenu zawierających ligandy skorpionianowe oraz ligandy mostkujące o różnej długości. Rozdział czwarty – moim zdaniem najciekawszy – zawiera uzasadnioną na drodze obliczeniowej propozycję mechanizmu elektrokatalitycznego rozkładu chloroformu wobec skorpionianowych kompleksów molibdenu. Całość zajmuje 67 stron.

Można zauważyć, że prace wchodzące w skład rozprawy zostały opublikowane dość dawno, bo w latach 2008–2013. Pomimo tego, składająca się z dwustu pozycji bibliografia uwzględnia 12 publikacji z ostatnich pięciu lat. Świadczy to o kontynuacji zainteresowań naukowych Autora i jego ciągłej aktywności.

Charakterystyka dorobku naukowego Autora

Klemens Noga jest współautorem pięciu prac opublikowanych w czasopismach lokujących się głównie w górnym kwartyle periodyków z zakresu elektrochemii, chemii nieorganicznej oraz fizyki chemicznej; cztery prace wchodzą w zakres recenzowanej rozprawy. W wykazie czasopism stanowiącym załącznik do komunikatu Ministra Nauki



i Szkolnictwa Wyższego z dnia 31 lipca 2019 r. periodykom tym przypisano wysoką punktację z zakresu od 100 do 140. Do dnia sporządzenia niniejszej recenzji prace Klemensa Nogi były cytowane 24 razy. Przytoczone dane liczbowe potwierdzają, że dorobek naukowy jest w zupełności wystarczający do uzyskania stopnia naukowego doktora.

Ocena rozprawy

Zawartość dysertacji uwidacznia ogólną wiedzę teoretyczną Autora wyrażającą się poprzez świadomość ograniczeń wynikających ze stosowanych metod obliczeniowych. Klemens Noga chętnie korzysta z licznych przybliżeń i podyktowanych rozsądkiem uproszczeń (np. nie angażując się w potencjalnie ryzykowne próby optymalizacji stanu przejściowego będącego punktem przecięcia hiperpowierzchni energii potencjalnej dla różnych stanów elektronowych o tej samej multipletowości), a jego argumentacja jest przekonująca. Dostrzega on znaczenie słabych oddziaływań w przebiegu procesu katalitycznego i w razie potrzeby nie waha się sięgać po metody oferujące tzw. dokładność chemiczną. Nie są mu obce pojęcia z zakresu katalizy i chemii fizycznej, co demonstruje oszacowując przesłanki przemawiające za i przeciw poszczególnym mechanizmom reakcji. Takie krytyczne podejście świadczy o umiejętności samodzielnego prowadzenia badań, a także o finezji warsztatu naukowego Klemensa Nogi oraz zespołu, w którym realizował swoje badania.

Pomimo wysokiej jakości rozprawy, niektóre jej elementy mogą być przedmiotem dyskusji. W tekście znajdują się wyraźne wzmianki (s. 33–34 oraz 76), że obliczenia prowadzone przy użyciu funkcjonałów hybrydowych prowadzą do wyników charakteryzujących się znacznym zanieczyszczeniem spinowym. To prawda; artefakt ten jest oczywiście źródłem błędów w optymalizacji geometrii, obliczeniach energii i analizie populacyjnej. W rozprawie nie przytoczono jednak przykładowych wartości spodziewanych kwadratu spinu uzyskiwanych rutynowo w trakcie obliczeń; informacji takich pozbawione są również publikacje wchodzące w zakres rozprawy. Idąc tym tropem, recenzent chciałby się dowiedzieć, czy planowane są próby badania skorpionianowych kompleksów molibdenu za pomocą metod wielowyznacznikowych.

Recenzent stoi także na stanowisku, że o ile trudno byłoby zakwestionować biologiczną rolę witaminy B₁₂ czy cytochromu P450, to – wbrew stwierdzeniu umieszczonemu na s. 17 – praca [67] raczej nie utwierdzi go w przekonaniu, że dla świata organizmów żywych również istotny jest dichlorek tytanocenu.

Sporadyczne nieprecyzyjne i żargonowe sformułowania, takie jak „zbadanie wpływu” (nie wyjaśniono na co; s. 1), „zbieżność obliczeń” (w domyśle: optymalizacji geometrii; s. 24), „stopień utlenienia kompleksu” (s. 48), „molibdenów” (s. 50), „krótkie długości” (s. 68), nie mają wpływu na wysoką jakość merytoryczną rozprawy. Spis bibliografii zawiera pewne nieścisłości, np. te dotyczące nazwisk dwóch redaktorów dzieła [61]. Ponadto pierwsze zdanie rozdziału 1.2 mogłoby mylnie sugerować, że kompleksy polipirazoliloboranowe są wyłącznymi przedstawicielami kompleksów skorpionianowych. Nieliczne błędy typograficzne i interpunkcyjne nie zasługują na wyszczególnienie.



Sformułowane powyżej krytyczne uwagi nie podważają wysokiej oceny rozprawy; są one bowiem jedynie elementem dyskursu naukowego.

Podsumowanie

Recenzowana rozprawa doktorska spełnia warunki określone w art. 13 ust. 1 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, a także art. 179 ustawy z dnia 3 lipca 2018 r. (przepisy wprowadzające ustawę prawo o szkolnictwie wyższym i nauce). Wnioskuje zatem do Rady Dyscypliny o dopuszczenie mgr. Klemensa Nogi do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Zygf. Rwał