



Prof. dr hab. Maria Barysz

e-mail: [teomjb@umk.pl](mailto:teomjb@umk.pl)

Toruń, 18 lutego 2023 r.

**Recenzja osiągnięcia naukowego dr. Inż. Rafała Wysokińskiego oraz  
całokształtu dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego  
w związku z Jego ubieganiem się o stopień naukowy doktora habilitowanego**

**Sylwetka Kandydata**

Od początku swojej kariery naukowej dr inż. Rafał Wysokiński jest związany z Politechniką Wrocławską. Ukończył studia inżyniersko-magisterskie na Wydziale Chemii. Pracę magistersko-inżynierską pt. „Własności koordynacyjne kwasów aminodifosfonowych. Kompleksowanie jonów Zn(II), Mg(II), Ca(II)” wykonał pod kierunkiem prof. dr hab. Ewy Matczak-Jon uzyskując tytuł zawodowy magistra inżyniera chemii. Pracę doktorską wykonał pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Danuty Michalskiej-Fąk pt. „Badania struktur i widm oscylacyjnych analogów cisplatyny metodami teorii funkcjonałów gęstości (DFT)”. W 2002 roku, bezpośrednio po doktoracie, został zatrudniony na 7 miesięcy na etacie asystenta naukowo-dydaktycznego w Instytucie Chemii Nieorganicznej i Metalurgii Pierwiastków Rzadkich Wydziału Chemii. W latach 01.2003-01.2004 zatrudniony był jako starszy referent ds. współpracy europejskiej w Wydziale Metalurgicznym. W okresie 02.2004-09.2005 ponownie zatrudniony zostaje w Instytucie Chemii Nieorganicznej i Metalurgii Pierwiastków Rzadkich. Ostatecznie, w październiku 2005 roku zostaje zatrudniony na czas nieokreślony w Katedrze Chemii Nieorganicznej i Strukturalnej Wydziału Chemii.

Dr inż. Rafał Wysokiński nie ma w swoim życiorysie żadnych staży podoktorskich.

Zanim przejdę do bardziej szczegółowej oceny osiągnięcia habilitacyjnego i dorobku, skupię się teraz na ocenie scjentometrycznej i informacjach zamieszczonych w materiałach

Habilitanta. Dr inż. Rafał Wysokiński jest współautorem 48 publikacji naukowych, z czego 44 ukazały się w czasopismach z listy filadelfijskiej. 8 publikacji ukazało się w formie Open Access, a 43 prace zostały publikowane po uzyskaniu stopnia doktora.

Warto odnotować 3 letnią przerwę okresu publikacyjnego w latach 2016-2018, po której następuje nagły, niezwykle intensywny wzrost aktywności publikacyjnej, 23 publikacje ukazały się w latach 2019-2022, z których większość związana jest z tematyką rozprawy habilitacyjnej.

Większość tych prac ukazała się w dobrych czasopismach takich jak Physical Chemistry Chemical Physics, ChemPhysChem, Polyhedron, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry A, nieco kontrowersyjnych czasopismach open access MDPI a jedna praca opublikowana została w Chemical Communications z Impact Factor 6.222 i punktacją MeIN 200.

Podstawą wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego jest cykl powiązanych tematycznie 10 artykułów naukowych, o sumarycznym Impact Factor 38,161, liczbie punktów MNiSW 1180. Są to dobre parametry. Prace cytowane były 39 razy. Biorąc pod uwagę fakt, że prace opublikowano w ostatnich 4 latach liczbę tę można uznać za akceptowalną.

Sumaryczna punktacja Impact Factor wszystkich opublikowanych prac wynosi 119,330 a sumaryczna liczba cytowań prac wynosi 1032. Indeks Hirsha doktora Wysokińskiego wynosi 19 i jest dobry dla kandydata do stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych pracującego czynnie w chemii obliczeniowej od ponad 20 lat (wliczając w to okres studiów doktorskich).

Habilitant nie był/nie jest promotorem pomocniczym prac doktorskich.

Aktywność konferencyjna dr. Rafała Wysokińskiego jest bardzo mała. Jak wynika z przedstawionych materiałów, wyniki prac doktora Wysokińskiego prezentowane były jedynie w formie wieloautorskich posterów (?). Tylko 3 ostatnie prezentacje związane były z tematyką rozprawy habilitacyjnej.

Dr inż. Rafał Wysokiński był zaproszony do recenzowania prac w czasopismach naukowych tylko 5 razy i to dopiero w 2022 roku.

Niestety, jak wynika z materiałów, dr inż. Rafał Wysokiński nie kierował żadnym projektem badawczym. Był jedynie wykonawcą projektów zespołowych Wydziału Chemicznego Politechniki Wrocławskiej.

Z powyższego syntetycznego podsumowania wysuwa się sylwetka uczonego, który dopiero w ostatnich 4-5 latach odnalazł swoją tematykę i drogę naukową.

### **Ocena osiągnięcia habilitacyjnego i dorobku naukowego Kandydata**

Zanim przejdę do oceny merytorycznej osiągnięcia habilitacyjnego dr. Inż. Rafała Wysokińskiego zajmę się stroną formalną. Na owo osiągnięcie składa się dziesięć publikacji naukowych [H1-H10], które ukazały się w dobrych czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym. W ośmiu z tych prac dr Wysokiński jest jednym z kilku autorów korespondencyjnych a w jednej pracy jedynym autorem-korespondentem.

Dr Wysokiński nie opublikował żadnej monografii naukowej, ani rozdziału w monografii.

Oświadczenia współautorów o ich wkładzie pracy w powstanie publikacji dowodzą rzeczywistej wieloautorskiej współpracy, co uważam za pozytywne. Dr hab. Wiktor Zierkiewicz odpowiadał za merytoryczną opiekę nad pracą, dr inż. Mariusz Michałak wykonał część obliczeń, [H1-H9], prof. Steve Scheiner „Helped or assisted in the development of the idea to be research”, dr Thierry Maris – odpowiadał za część doświadczalną prac [H9 i H10]. Każda z wymienionych osób brała udział, w mniejszym lub większym stopniu, w przygotowaniu manuskryptu.

W tym kontekście warto zwrócić uwagę na fakt, że dr inż. Wysokiński w siedmiu pracach jest pierwszym autorem, w ośmiu autorem korespondencyjnym, a jedna praca jest monoautorska co świadczy o Jego wiodącej roli w pracach.

W swoich badaniach dr inż. Rafał Wysokiński zajął się tzw. niekowalencyjnymi oddziaływaniami dziurowymi znanymi pod różnymi nazwami w zależności od atomu wiązania i geometrii oddziaływania. Najwcześniej opisanym i najintensywniej badanym oddziaływaniem niekowalencyjnym jest wiązanie wodorowe.

Powstanie oddziaływań niekowalencyjnych tłumaczy się anizotropią redystrybucji gęstości elektronowej atomu w cząsteczce. Tworzą się obszary o niskiej gęstości elektronowej na wybranym atomie i centrum przyciągające z zasadą Lewisa. Kiedy taki dodatni obszar pojawia się na przedłużeniu wiązania kowalencyjnego  $\sigma$ , jest określany jako „dziura  $\sigma$ ”. Podobnie, gdy obszar o niskiej gęstości elektronowej jest prostopadły do płaszczyzny molekularnej, nazywa się to „dziurą  $\pi$ ”. Opisane centra odgrywają rolę kwasu Lewisa, chociaż większość z nich to atomy elektroujemne.

Uważa się, że istnieje kilka kategorii oddziaływań niekowalencyjnych; wiązania berylowe, węglowców (grupa 14), pnikogenów (grupa 15), chalkogenów (grupa 16), halogenowe (grupa 17) i helowcowe (grupa 18). Każda z grup wiązań niekowalencyjnych stanowi obecnie integralną część niezależnych obszarów badań naukowych.

Badania teoretyczne doktor Wysokiński prowadził w standardowy, typowy dla tego typu badań sposób. Składały się one z kilku etapów:

1. etap 1: optymalizacja geometrii i wyznaczanie długości wiązań w molekułach. Optymalizacja struktury geometrycznej obejmowała kilka poziomów obliczeniowych. Stosowano metody MP2, CCSD(T) oraz DFT z funkcjonalami M06-2X oraz BLYP i PBE0 z poprawką na oddziaływania dyspersyjne opracowaną przez Grimme'a. W obliczeniach używano kosystentnych korelacyjnie baz atomowych podwójnego i poczwórnego zeta, aug-cc-pVDZ i aug-cc-pVQZ z funkcjami polaryzacyjnymi oraz w metodzie DFT baz Def2-TZVPP i DEF2-TZVP. Efekty relatywistyczne uwzględniano bardzo uproszczoną metodą ZORA oraz metodami efektywnych pseudopotencjałów (PP). Wpływ rozpuszczalnika uwzględniano stosując model SCRF i PCM.
2. Etap2: analiza rozkładu energii oddziaływań w kompleksach. Stosowano nieskomplikowaną metodę LMOEDA (Localized Molecular Orbital Energy Decomposition Analysis z poprawką BSSE na błąd superpozycji bazy) o łatwym dostępie w pakietach programowych oraz schemat ADF-EDA.
3. Etap3: Kwantowe badania topologiczne układu i jego składowych. Stosowano topologiczną metodę gęstości elektronowej Badera AIM (Atoms in Molecules) i pojęcie punktu krytycznego wiązania, Metodę stosuje się od kilkudziesięciu lat mimo tego, że sama koncepcja metody jest oceniana niejednoznacznie.
4. Etap4: Analiza molekularnego potencjału elektrostatycznego (MEP) odgrywa kluczową rolę w badaniach gdyż opisuje oddziaływania dziur. Rzadko zdarza się, aby jakiegokolwiek badanie na temat niekowalencyjnych oddziaływań nie obejmowało dyskusji na temat MEP. Badana izopowierzchnia jest zwykle ustawiona w obliczeniach dla standardowej wartości gęstości elektronowej równej 0,001 au. Jedną z miar porównawczych elektrostatycznej mocy dziury w stosowanym podejściu jest maksymalny potencjał dziury.

Przejdę teraz do omówienia prac [H1-H10].

Celem wszystkich przedstawionych do oceny prac jest teoretyczne badanie molekuł w których mogą pojawiać się niekowalencyjne oddziaływania dziurowe  $\sigma$  i  $\pi$  oraz analiza składowych tych oddziaływań. Ma to być podstawą do zrozumienia przyczyn powstawania molekuł, które zgodnie z teorią oddziaływań elektrostatycznych wiązania nie powinny się tworzyć. W większości analiz badane są układy hipotetyczne, ale nie zawsze tak jest. Często bada się również struktury wybrane z krystalograficznych baz.

Zacznę od pracy [H1]. Doktor Wysokiński bada molekuły typu  $ChTXY$  gdzie T oznacza atom węgłowca (C, Si, Ge); Ch oznacza atom tlenowca (S, Se); a X, Y to podstawniki: H,  $CH_3$ , Cl, Br, I. W przypadku każdego układu analizowano zdolności akceptorowe atomu chalkogenu (tlenowca) względem obojętnych zasad Lewisa: kwasu cyjanowodorowego (HCN) i jego metylowej pochodnej. Badano właściwości kompleksów izolowanych oraz z uwzględnieniem rozpuszczalnika o różnej stałej dielektrycznej. Dla wszystkich układów  $ChTXY$  ( $T=C$ ) dziury  $\sigma$  na atomie tlenowca wykazywały dodatni potencjał, którego wartość w maksimum podlegała niewielkim zmianom w zależności od rozpuszczalnika co wskazuje zdaniem Habilitanta na podatność do tworzenia wiązania chalogenkowego. Natomiast druga grupa kwasów  $ChTXY$  ( $T=Si, Ge$ ) charakteryzowała się ujemnymi wartościami potencjału  $\sigma$  dziury co nie wskazywało na oddziaływanie z nukleofilem mimo że takie oddziaływanie, jak wynika z obliczeń kwantowych, są możliwe. Okazało się, że dla  $T=C$ , wykonanie obliczeń w odległości dla której gęstość izopowierzchni różna była od standardowej wartości 0.001, zwiększa dwukrotnie wartość maksymalnego potencjału a w grupie  $T=Si, Ge$  zmienia się nawet jego znak na dodatni. Habilitant właśnie tym zmianom tłumaczy występujące różnice interpretacyjne.

Widzę w tym pewien problem. Czy nie mamy tutaj do czynienia jednak z pewną manipulacją?

Moje wątpliwości budzą również bardzo małe, obliczone wartości niektórych energii wiązań, czasem nawet ok. 1 kcal/mol. Czy na pewno stosowane metody obliczeniowe są aż tak dokładne? Problem ten dotyczy wielu prezentowanych prac.

W pracy [H2], dr Wysokiński bada możliwość tworzenia się wiązań pnikogenowych łączących anionowe kwasy Lewisa ( $ZCl_4$  gdzie  $Z=P, As$  i  $Sb$ ) posiadających dziurę  $\sigma$ , z neutralną (NCH i pirydyna) i anionową ( $CN^-$ ) zasadą.



W pracy [H3] badano zdolność anionu  $\text{TrCl}_4^-$  ( $\text{Tr} = \text{Al, Gs, In, Tl}$ ) do tworzenia wiązania z neutralnym  $\text{NH}_3$  i z anionem  $\text{CN}^-$ .

W pracach [H4, H5] Habilitant przeprowadza analizę oddziaływań w układach anionowych z dziurą  $\pi$ . Jako układy modelowe do badań, wybrano aniony  $\text{MCl}_4^-$ , gdzie M jest metalem ziem alkalicznych (Be, Mg, Ca, Sr, Ba), praca H4 lub pierwiastkiem grupy 12 układu okresowego (Zn, Cd, Hg), praca H5. Zasadę Lewisa był ponownie jon cyjankowy. Badania struktur molekularnych prowadzono dla próżni i wody.

Wyniki badań oddziaływań niekowalencyjnych w układach tych powstałych z dwóch takich samych anionów  $\text{Ch}(\text{CH}_3)_3\text{X}_4^-$  gdzie  $\text{Ch} = \text{S, Se, Te}$ ;  $\text{X} = \text{Cl, Br, I}$  stabilizowanych wiązaniem chalcogenowym przedstawiono w pracy [H6].

W pracach (H7, H8, H9, H10) dr Wysokiński przedstawia wyniki badań dla potencjalnie możliwego oddziaływania pomiędzy anionowymi monomerami w sieci krystalicznej oraz w rozpuszczalnikach o różnej stałej dielektrycznej. Struktury do badań wybrano w wyniku analizy bazy krystalicznej Cambridge Structural Data Base, Badano planarne aniony  $(\text{HgCl})_3^-$  (praca H7), aniony  $(\text{MX}_3)^-$  zawierające metal przejściowy z grupy cynkowców ( $\text{M} = \text{Zn, Cd, Hg}$ ;  $\text{X} = \text{Cl, Br, I}$ ). Badania prowadzono w fazie gazowej, wodzie i etanolu (praca H8).

W pracach (H9, H10) przedstawiono wyniki badań teoretycznych dla zsyntetyzowanego przez dr. Thierry Morisa (Kanada) kryształu kompleksu dwuanionów  $[\text{PdCl}_4]^{2-}$ . Analizę teoretyczną potencjalnych wiązań wodorowych decydujących o stabilności struktury wykonano metodą DFT z funkcjonałem PBE0-D3 z poprawką dyspersyjną w bazie def2TZVP (H9, H10).

Czytając dwie ostatnie publikacje (H9, H10) z wysoką punktacją i wysokimi impact factorami nie mogę się oprzeć wrażeniu, że są one do siebie bardzo podobne.

Muszę przyznać, że ogrom prezentowanych wyników, tabel, analiz po prostu przytłacza. Czy na pewno trzeba wykonywać aż tyle obliczeń. Liczba możliwych hipotetycznych kompleksów, molekuł jest praktycznie nieograniczona. Mam wrażenie, że to nie jest do końca właściwa droga, zapewnia ona dużą liczbę publikacji, ale czy te wyniki na pewno są aż tak cenne?

W trakcie badań zmienia się również ich metodologia. Początkowo obecność dodatniego potencjału dziury  $\sigma$  lub  $\pi$  uważana jest za podstawowy warunek do tworzenia wiązania niekowalencyjnego. Dalsze badania wskazują, że to kryterium nie zawsze jest wystarczające

do tego by tworzyło się wiązanie. Używa się więc pojęcia obszaru o obniżonej gęstości elektronowej (moim zdaniem bardziej prawidłowo). Podobnie jest z wartością gęstości elektronowej izopowierzchni. W przypadkach, gdy standardowa wartość gęstości nie daje satysfakcjonujących wyników zmienia się jej wartość.

Kolejny problem, koncepcja korelacji „siły” dziury z siłą wiązania jest chyba daleka od doskonałości.

Nowatorskość pomysłów i idei.

Przedstawiona w pracach tematyka badań nie jest nowatorska. Dr inż. Wysokiński bada hipotetyczne wiązania niekonwalencyjne w różnych, często modelowych strukturach. Podobnych prac ukazało się do tej pory w literaturze światowej setki. Są one bardzo często wzajemną kopią. Zmieniają się rodzaje wiązań, którym często przypisuje się bardzo dziwne nazwy. W prowadzonej dyskusji jest bardzo dużo „rozmytej logiki”.

### **Ocena dorobku dydaktycznego, popularyzatorskiego i organizacyjnego**

Dr inż. Rafał Wysokiński ma dosyć bogaty dorobek dydaktyczny, popularyzatorski i organizacyjny, i skupię się w tej recenzji na najważniejszych według mnie wątkach.

Dr inż. Rafał Wysokiński prowadził szereg zajęć laboratoryjnych oraz ćwiczeń z chemii ogólnej, podstaw chemii nieorganicznej, chemii nieorganicznej i podstaw chemii analitycznej. Przygotował skrypt do zajęć laboratoryjnych z zakresu chemii ogólnej i nieorganicznej.

Był promotorem jedenastu prac magisterskich.

Dr Wysokiński aktywnie uczestniczył w projekcie „ Młody chemik eksperymentuje” w Politechnice Wrocławskiej. W latach 2019-2021 (cztery semestry) prowadził zajęcia laboratoryjne z zakresu chemii ogólnej, nieorganicznej i analitycznej dla szkół podstawowych, gimnazjalnych i średnich w ramach wyrównywania szans dla uczniów ze wsi i małych miasteczek (projekt współfinansowany ze środków Europejskiego Funduszu Społecznego).

W ramach współpracy Politechniki Wrocławskiej z wrocławskimi szkołami średnimi prowadził kilka lat zajęcia pozalekcyjne w szkołach.

Dr inż. Wysokiński odbył, w ramach projektu „Politechnika nowych szans” szkolenie z zakresu pracy z osobami niepełnosprawnymi.

W 2021 roku dr Wysokiński został wyróżniony nagrodą Rektora Politechniki Wrocławskiej w uznaniu wyróżniającego wkładu w działalność Uczelni.

Konkludując tę część recenzji uważam, że działalność dydaktyczna, popularyzatorska i organizacyjna dra inż. Rafała Wysokińskiego może być uznana za godną wyróżnienia.

### **Podsumowanie**

Podsumowując tę recenzję wyrażam moją pozytywną opinię o dorobku naukowym dr. Inż, Rafała Wysokińskiego o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego.

Uważam jednak, że Jego osiągnięcia naukowe są na granicy akceptowalności co próbowałam uzasadnić w przedstawionej Opinii.

  
Prof. dr hab. Maria Barysz