



Politechnika Łódzka

Wydział Chemiczny

Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej

prof. dr hab. inż. Małgorzata Iwona Szyrkowska-Jóźwik

RECENZJA

**o całokształcie dorobku naukowego, dydaktycznego,
organizacyjnego oraz rozprawie habilitacyjnej dr. Pawła Mateusza
Nowaka pt. "Białe" spojrzenie na zieloną chemię analityczną – nowa
teoria, narzędzia oceny, techniki i metodologie**

Recenzja została opracowana na zlecenie Przewodniczącego Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie prof. dr hab. Artura Michalaka w oparciu o pismo z dnia 5 lutego 2024 r.

Ocena została przeprowadzona na podstawie dokumentacji do wniosku o wszczęcie postępowania habilitacyjnego zawierającą wykaz osiągnięć oraz informacje na temat aktywności Habilitanta, kopie publikacji oraz oświadczenia współautorów a także autoreferat omawiający cykl publikacji: pt.: "Białe" spojrzenie na zieloną chemię analityczną – nowa teoria, narzędzia oceny, techniki i metodologie.

Przebieg kariery naukowej Habilitanta

Pan dr Paweł Nowak uzyskał tytuł licencjata biotechnologii w 2010 r. a następnie tytuł magistra biotechnologii w 2012 r. na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Stopień doktora nauk chemicznych w zakresie chemii nadany uchwałą Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie Habilitant uzyskał w 2016 r. przedstawiając rozprawę zatytułowaną „*Novel bioanalytical methods using the capillary electrophoresis technique*”. Promotorem pracy był prof. dr hab. Paweł Kościelniak, a promotorem pomocniczym dr hab. Michał Woźniakiewicz. Recenzentami dysertacji byli prof. dr hab. Roman Kaliszan i prof. dr hab. Marek Trojanowicz. W 2016 roku Habilitant został zatrudniony na stanowisku asystenta na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie (październik 2016 – wrzesień 2018), a następnie na stanowisku adiunkta, od października 2018 r. do dnia dzisiejszego.

Ocena osiągnięcia naukowego będącego podstawą o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego

Jako osiągnięcie habilitacyjne dr Paweł Nowak przedstawił cykl 9 artykułów naukowych opublikowanych w bardzo dobrych czasopismach z listy JCR w latach 2017-2023. Łączny współczynnik wpływu tych publikacji podany we wniosku wynosi $IF=59,5$. Średnia wartość IF na jedną publikację Habilitanta odpowiada wartości 6,61. Liczba cytowań ww. prac wg bazy Scopus wynosiła 348. Największą liczbę cytowań uzyskały prace [H1] - 105 cytowań oraz [H2] - 172 cytowania (dane na dzień 26.09.2023), co oznacza, że zostały one zauważone przez społeczność naukowców zajmujących się analityką chemiczną, zieloną chemią i zieloną chemią analityczną.

Podstawą osiągnięcia są artykuły opublikowane w czasopismach: [H1, H9] *Analytical Chemistry*, [H2] *Trends in Analytical Chemistry*, [H3] *Green Chemistry*, [H4] *Journal of Chromatography A*, [H5] *Analyst*, [H6, H7] *Molecules*, [H8] *Analytical and Bioanalytical Chemistry*.

Prace te zostały ocenione przez gremium ekspertów powołanych przez czasopisma w związku z czym ich wysoki poziom naukowy został potwierdzony. We wszystkich załączonych publikacjach Kandydat jest pierwszym, a w dwóch jedynym autorem. Załączone oświadczenia Habilitanta i współautorów oraz „*CRedit authorship contribution statement*” [H6, H7] świadczą o Jego decydującej roli w opracowaniu koncepcji prac naukowych. W 8 publikacjach Kandydat jest autorem korespondencyjnym, a więc pozwala to na stwierdzenie, że Jego udział w powstaniu publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego jest znaczący, co wypełnia wymagania określone w Ustawie.

Problematyka naukowa przedstawiona w pracach wniosku jest bardzo aktualna i znajduje się w trendzie rozwoju nowych koncepcji i narzędzi wykorzystywanych w ocenie zieloności, proponowania nowych hipotez badawczych a także tworzenia nowych technik i metod zgodnych z założeniami *Green Analytical Chemistry* (GAC). Habilitant zaproponował podział swojego osiągnięcia na 3 jednostkowe zagadnienia:

- Opracowanie nowych podstaw teoretycznych zielonej i białej chemii [H2, H3],
- Opracowanie i implementacja nowych narzędzi oceny zieloności [H1, H2, H4],
- Opracowanie i rozwój nowych technik badawczych i metodologii pomiaru, spójnych z koncepcjami GAC i WAC [H5–H9].

W artykule H1 przedstawiono model RGB (*Red-Green-Blue*) jako nowe narzędzie oceny metod analitycznych. Zrobiono założenie, że metoda analityczna oprócz zielonego koloru może być opisana również innymi barwami, takimi jak kolorem czerwonym

określającym efektywność analityczną (kryteria walidacyjne) oraz niebieskim określającym kryteria praktyczne oraz ekonomiczne. Zaproponowano, aby metoda, która jest jednocześnie efektywna analitycznie, ekologiczna oraz praktyczna była przedstawiana kolorem białym. Dodatkowo, zaprojektowano arkusz Excel, który automatyzuje proces oceny dzięki wprowadzonym formułom i formatowaniu warunkowemu.

W pracy H2 rozwinięta jest idea modelu RGB oraz przedstawiona nowa koncepcja „Biała Chemia Analityczna” (*White Analytical Chemistry, WAC*) wraz z 12 ogólnymi zasadami WAC nawiązującymi do znanych 12 zasad GAC. WAC jest rozszerzeniem GAC o aspekty decydujące o funkcjonalności metody, czyli kryteria analityczne (czerwone) i praktyczno-ekonomiczne (niebieskie).

W pracy H3 przedstawiona jest „Zunifikowana Teoria Zieloności” (*Unified Greenness Theory*), która zawiera m.in. krytyczną analizę obecnej teorii zielonej chemii, nowe definicje wybranych pojęć, pierwszy opis matematyczny głównych pojęć, określa „pierwiastki zieloności”, nowy zbiór nadrzędnych reguł zielonej chemii oraz pokazuje konieczność współpracy interdyscyplinarnej i poszukiwania rozwiązań kompromisowych.

W pracy H4 przedstawiono dwie nowe metody analityczne oparte na wysokosprawnej chromatografii cieczowej (HPLC) i elektroforezie kapilarnej (CE), pozwalające na rozdzielanie i efektywną analizę jakościową i ilościową wybranych barwników oraz konserwantów spożywczych. Materiałem badawczym były popularne napoje izotoniczne. Całościowy potencjał opracowanych metod, włączając w to kryteria zielone, został oceniony i porównany za pomocą opracowanego modelu RGB. Stwierdzono, że zaletą techniki HPLC są jej walory analityczne, czyli czerwone, natomiast technika CE jest przyjazna dla środowiska.

W artykułach H5-H7 przedstawiona jest tematyka związana z realizowanym przez Habilitanta projektem Opus pt. „Kompleksowa ocena analitycznego potencjału elektroforezy kapilarnej sprzężonej z mikroskalową termoforezą (CE-MST)”. Celem badań jest ocena potencjału nowej techniki CE-MST zgodnie z założeniami zielonej chemii (uwzględniające m.in. miniaturyzację, automatyzację pomiaru, oszczędność odczynników, skrócenie czasu bądź eliminację etapu przygotowania próbek) za pomocą modelu RGB.

Artykuły H8-H9 przedstawiają wyniki badań i skuteczne strategie korekcyjne dotyczące poprawy efektywności analitycznej techniki CE poprzez próbę eliminacji niepożądanych efektów (m.in. wahania przepływu elektroosmotycznego, niestabilność wewnętrznej powierzchni kapilary) i dające poprawę całościowej wartości CE jako techniki, uwzględniając jej „zielone” walory.

Podsumowując tę część recenzji stwierdzam, że przeprowadzone badania i przedstawiony cykl publikacji dr. Pawła Nowaka posiadają wymagany aspekt nowości i spełniają ustawowy warunek znaczącego wkładu w rozwój wiedzy w dyscyplinie nauk chemicznych. Istotnymi osiągnięciami Habilitanta są:

- Opracowanie modelu RGB jako jednego z ważnych narzędzi oceny kompleksowej metod w chemii analitycznej;
- Opracowanie koncepcji WAC i pokazanie możliwości kształtowania odpowiednich standardów dotyczących ogólnego podejścia do rozwijania i oceny metod analitycznych;
- Przedstawienie propozycji idei Białej Chemii jako nadrzędnej w stosunku do Zielonej Chemii;
- Zastosowanie modelu RGB do oceny praktycznej opracowanych metod analitycznych i określenia ich całościowego potencjału;
- Opracowanie metody pozwalającej wyznaczyć powinowactwo układu molekularnego (względem protonu) za pomocą nowej techniki CE-MST;
- Opracowanie i rozwój nowych technik badawczych spójnych z ideami GAC i WAC.

Wszystkie prace pokazują dużą aktywność i zakres zainteresowań naukowych Habilitanta związanych z rozwijaniem i implementacją koncepcji GAC i WAC oraz zdolność do podejmowania ambitnych wyzwań badawczych.

Ocena pracy dydaktycznej i organizacyjnej

Dr Paweł Nowak jest aktywnym i doświadczonym nauczycielem akademickim, prowadzi różne formy zajęć od 2017 roku początkowo jako asystent, a następnie jako adiunkt. Wykazuje się również działalnością w opiece naukowej nad realizowanymi pracami dyplomowymi jako promotor 5 obronionych prac magisterskich na kierunku chemia medyczna. Jest promotorem pomocniczym w przewodzie doktorskim mgr Iwony Biel (promotor dr hab. Michał Woźniakiewicz).

Habilitant angażuje się również w działalność organizacyjną oraz popularyzującą naukę, wielokrotnie brał udział w Festiwalu Nauki na Rynku Głównym w Krakowie jako współorganizator stoiska Pracowni Chemii Sądowej.

Brał udział w projekcie dydaktycznym Erasmus+ "*STEM Continuous Professional Development at European Universities – STEM-CPD@EUni*", 2023, gdzie przygotowano materiały edukacyjne dotyczące tematyki zielonej chemii z wykorzystaniem nowoczesnej technologii sztucznej inteligencji oraz w projekcie dydaktycznym realizowanym z Funduszy Strukturalnych „StartUJ program zwiększenia szans na rynku pracy studentów nauk

ścisłych i przyrodniczych” (2016-2019), którego celem było podniesienie kompetencji studentów w obszarze wybranych technik analitycznych.

Od roku 2020 jest członkiem Zespołu Chromatografii Komitetu Chemii Analitycznej PAN, którego Przewodniczącym jest prof. dr hab. Bogusław Buszewski. Od 2021 r. jest członkiem Komitetu Redakcyjnego czasopisma *Green Analytical Chemistry*, Elsevier. Był również członkiem Komitetów Organizacyjnych konferencji naukowych tj.: *International Conference FLOW ANALYSIS XV* (2022), Kraków; *Symposium Flow Analysis & Capillary Electrophoresis* (2021), Kraków; pomagał w organizacji konferencji *Flow Analysis & Capillary Electrophoresis* (2016), Kraków, *European Winter Conference on Plasma Spectrochemistry* (2013), Kraków; IV Konferencja Polskiego Towarzystwa Biologii Eksperymentalnej Roślin (2009), Kraków.

Habilitant uzyskał wiele nagród i wyróżnień m.in. Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców (2019); Nagrodę im. Edwarda Romanowskiego Komitetu Chemii Analitycznej PAN za osiągnięcia naukowe dedykowane młodym naukowcom (2018); Nagrodę Komitetu Chemii Analitycznej PAN ufundowaną przez firmę Perlan Technologies za rozprawę doktorską (2017); Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wybitne osiągnięcia naukowe dla doktorantów (2015); Nominację do Nagrody „Naukowiec Przyszłości 2021”; Stypendium wyjazdowe ufundowane przez firmę Chromaleont pozwalające na udział w 38. Międzynarodowym Sympozjum Chromatografii Kapilarnej (Włochy, 2014).

Ocena całości dorobku naukowego

W dniu składania wniosku, całkowity dorobek naukowy dr. Pawła Mateusza Nowaka składał się z 52 publikacji, w tym 36 po uzyskaniu stopnia doktora. Sumaryczny współczynnik wpływu wszystkich publikacji wynosił $IF = 247,60$ ($IF = 63,00$ przed obroną doktoratu), (*Journal Citation Reports 2022*). Prace były cytowane wg *Scopus* 861 razy (649 bez autocytowań) wg *Scopus*. Indeks Hirscha wynosił $H = 16$ (*Scopus*). Habilitant jest również współautorem 3 i autorem 1 rozdziału w monografiach krajowych (PWN) i międzynarodowych (*Springer, Nowa Science Publishers*). Jest współautorem 36 wystąpień konferencyjnych o zasięgu krajowym i międzynarodowym, w tym 3 wykładów na zaproszenie, 14 prezentacji ustnych i 19 komunikatów posterowych.

Dane scjentometryczne Habilitanta są bardzo dobre, jak również Jego aktywny udział w realizacji 6 projektów, gdzie w trzech projektach pełnił funkcje kierownika (PRELUDIUM, IUVENTUS-PLUS), a jeden realizowany jest jeszcze obecnie (OPUS).

Dr Paweł Nowak wykonał 56 recenzji w latach 2017-2023 dla czasopism o bardzo wysokim i wysokim współczynniku oddziaływania m.in. *Green Chemistry*, *Trends in Analytical Chemistry*, *Analytical Chemistry*, *Microchemical Journal*, *Journal of Chromatography A*, *Electrophoresis*, *LWT - Food Science and Technology*, *Green Analytical Chemistry*. Recenzował również granty wydziałowe w ramach projektu ID.UJ na Wydziale Chemii UJ (2022).

Dr Paweł Nowak obecnie pełni funkcję „*editora*” w ramach międzynarodowego Komitetu Redakcyjnego *Green Analytical Chemistry* w wydawnictwie Elsevier, co już przekłada się i zapewne będzie wpływać w przyszłości na coraz większą Jego rozpoznawalność w międzynarodowym środowisku naukowym.

Habilitant prowadzi szeroką współpracę z wieloma jednostkami w kraju i za granicą, która potwierdzona już jest lub będzie w najbliższej przyszłości wspólnymi publikacjami naukowymi (*University of Waterloo, Department of Chemistry, Waterloo, Ontario, Kanada; Institute of Environmental Assessment and Water Research, Barcelona, Hiszpania; University of Rome Tor Vergata, Roma, Włochy; University of Messina, Department of Chemistry Biology Pharmacy and Environmental Sciences, Messina, Włochy; University of Valencia, Faculty of Chemistry, Burjassot, Hiszpania; Zakład Chemii Organicznej, Wydział Farmaceutyczny, Collegium Medicum UJ; Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Analitycznej*).

Kandydat odbył 3 krótkoterminowe staże naukowe, 2 przed doktoratem- staż w *Inter-Med Discovery*, Dortmund, Niemcy, pod opieką Prof. Marc Stadler (1 miesiąc) oraz w Zakładzie Toksykologii Sądowej w Instytucie Ekspertyz Sądowych, Kraków, pod opieką dr. Wojciecha Lechowicza (2 tygodnie). Staż po doktoracie odbył w Warszawskim Uniwersytecie Medycznym, na Wydziale Farmacji w ramach współpracy naukowej z dr hab. Łukaszem Szeleszczukiem (2023, 1 miesiąc).

Biorąc pod uwagę staże odbyte przed i po uzyskaniu doktoratu, warunek ustawy dotyczący aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej uczelni lub instytucji naukowej uważam za spełniony.

Dr Paweł Nowak w autoreferacie przedstawił również ambitne plany związane z kontynuacją swoich zainteresowań naukowych i rozwijaniem dalszych obszarów badawczych związanych z implementacją idei zielonej chemii do metod obliczeniowych realizowanych za pomocą algorytmów komputerowych, porównanie zieloności metod stosowanych w laboratoriach o różnym profilu oraz wykorzystanie możliwości zastosowania sztucznej inteligencji w odniesieniu do zielonej chemii.

Stwierdzam, że całokształt dorobku naukowego, dydaktycznego, organizacyjnego oraz rozprawa habilitacyjna jest potwierdzeniem dobrego przygotowania dr. Pawła Nowaka do pracy samodzielnego pracownika nauki. Zawartość merytoryczna publikacji, oryginalność przedstawionych wyników, jak również ich znaczenie poznawcze i potencjalne aspekty aplikacyjne mają znaczny wpływ na rozwój dyscypliny nauki chemiczne.

Wniosek końcowy

Rozprawa habilitacyjna zatytułowana „*Białe*” *spojrzenie na zieloną chemię analityczną, nowa teoria, narzędzia oceny, techniki i metodologie*” jak również całokształt dorobku naukowego, dydaktycznego oraz innych osiągnięć **dr. Pawła Mateusza Nowaka** spełnia wymagania formalne stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego określone w art. 219 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 r. (z późn. zm.). Przedstawiony do oceny cykl prac będących osiągnięciem naukowym Habilitanta, uznaję za istotny wkład w rozwój reprezentowanej przez Niego dziedziny naukowej.

Podsumowując stwierdzam, że dr Paweł Mateusz Nowak zasługuje na uzyskanie stopnia doktora habilitowanego i wnoszę rekomendację do Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie o nadanie Mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.



prof. dr hab. inż. Małgorzata Iwona Szynkowska-Jóźwik