



Gdańsk, 2024-03-05

**Recenzja dorobku naukowego
w sprawie nadania lub odmowy nadania
stopnia doktora habilitowanego Panu dr. n. chem. Pawłowi Mateuszowi Nowakowi**

Postępowanie w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne, prowadzi Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie według posiadanych uprawnień i wymaganych procedur.

Pan dr n. chem. Paweł Nowak w 2010 r. uzyskał tytuł licencjata biotechnologii, a w 2012 r. tytuł magistra biotechnologii po ukończeniu studiów na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Pracę naukową na tym samym Wydziale rozpoczął w 2016 r. jako asystent i od 2018 r. jako adiunkt, wcześniej realizując pracę doktorską. Stopień doktora nauk chemicznych (promotor: Pan prof. dr hab. Paweł Kościelniak, promotor pomocniczy: dr hab. Michał Woźniakiewicz) uzyskał w 2016 r. na podstawie pracy doktorskiej pt.: „*Novel bioanalytical methods using the capillary electrophoresis techniques*”.

Osiągnięcia naukowe

Kandydat do stopnia doktora habilitowanego wykazuje współpracę naukową z badaczami z krajowych i zagranicznych ośrodków naukowych. Doświadczenie zawodowe po uzyskaniu stopnia doktora wynikające z pracy samodzielnej oraz bezpośredniej współpracy z innymi naukowcami, jak również potwierdzone dorobkiem naukowym w postaci publikacji o zasięgu międzynarodowym, zasługuje na pozytywną uwagę.

Zainteresowania badawcze Pana dr. n. chem. Pawła Nowaka od początku pracy naukowej, podjętej w 2012 r., koncentrują się w obszarze badawczym dotyczącym zielonej chemii oraz zaangażowaniu warsztatu analityki chemicznej opartej o techniki elektroforetyczne i chromatograficzne. Posiada On doświadczenie zawodowe w zakresie nowoczesnej analityki, chemii analitycznej oraz opracowania zaawansowanych strategii analitycznych. Prowadzone, zasadniczo głównie we współpracy z polskimi ośrodkami naukowymi, badania mają charakter poznawczy, wpisując się w próbę wyjaśniania zjawisk chemicznych z wykorzystywaniem specjalistycznej, oryginalnej metodologii analitycznej, z równoczesną interpretacją o potencjale bezpośrednio praktycznym, w tym ze szczególną intencją w kierunku zielonej chemii.

Przeważającą część dorobku publikacyjnego wydanego w czasopismach posiadających *Impact factor* Pan dr n. chem. Paweł Nowak zgromadził po obronie swojej pracy doktorskiej

(nie mniej na pozytywną uwagę zasługuje także dorobek zgromadzony przed uzyskaniem stopnia doktora). Obejmuje on w tej chwili 52 prace pełnotekstowe (o sumarycznym IF = 247,60; przy tym przed doktoratem 16 publikacji o łącznym IF = 63,00). W całym dorobku publikacyjnych Pan dr n. chem. Paweł Nowak jest aż 41 razy pierwszym współautorem publikacji naukowych w czasopismach znajdujących się w bazie *Journal Citation Reports*. W czasopismach znajdujących się poza bazą *Journal Citation Reports*, Habilitant jest współautorem jednej publikacji (z 2013 r.), przy czym jest dodatkowo współautorem czterech rozdziałów w kategorii monografii naukowych (zawsze jako pierwszy autor rozdziału/podrozdziału). Deklarowany przez Habilitanta wkład pracy do poszczególnych publikacji nie budzi formalnych zastrzeżeń. Według przedstawionej dokumentacji (oraz wg bazy Scopus) prace Pana dr. n. chem. Pawła Nowaka posiadają już 861 niezależnych cytowań (649 bez autocytowań), a indeks Hirscha wynosi 16 (nieco większe wartości liczbowe odnotowuje baza Google Scholar). Standardowe parametry bibliometryczne można uznać za w pełni zadowalające w przypadku kandydata do habilitacji w zakresie dziedziny nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne; wykazanie potencjału w zakresie samodzielnego prowadzenia działalności naukowej oraz uwiarygodnienie bezpośrednio, wiodącej inicjatywy twórczej podczas realizacji zadań badawczych nie budzi w opinii recenzenta żadnych wątpliwości.

Pan dr n. chem. Paweł Nowak wykazuje także aktywność sympozjalną: jest współautorem 36 doniesień konferencyjnych (w tym 19 prezentacji posterowych; 13 z nich przed uzyskaniem stopnia doktora). Wygłosił 17 prezentacji ustnych (4 przed uzyskaniem stopnia doktora), w tym 3 na konferencjach międzynarodowych (w Hradec Kralove, Gdańsku i Tallinie).

Pozycja naukowa Habilitanta jako osoby kreującej oraz opiniotwórczej w zakresie prowadzenia i rozwijania nowych trendów badawczych jest również zauważalna w środowisku specjalistycznym. Potwierdzeniem tego jest recenzowanie manuskryptów prac nadsyłanych do publikacji do czasopism rangi międzynarodowej (wymieniono 56 manuskryptów z lat 2017-2023), udział w pracach Zespołu Chromatografii Komitetu Chemii Analitycznej PAN i pełnienie funkcji edytora w ramach międzynarodowego komitetu redakcyjnego czasopisma *Green Analytical Chemistry* od 2021 r.

Habilitant odbył po uzyskaniu stopnia doktora tylko jeden krótkoterminowy staż naukowy w ośrodku krajowym. Staż naukowy 1-miesięczny miał miejsce w Zakładzie Chemii Organicznej i Fizycznej Warszawskiego Uniwersytetu Medycznego (w ramach współpracy z Panem dr hab. Łukaszem Szeleszczukiem), której efektem jest publikacja w przygotowaniu do wysłania. Przy tym warto zauważyć, że ta współpraca wnosi nowy kierunek, interesujący badawczo, który łączy dotychczasowe doświadczenia Habilitanta w zakresie przełożenia oceny zieloności metod analitycznych na ocenę zieloności metod teoretycznych podczas modelowania parametrów fizykochemicznych cząsteczek chemicznych. Istotne efekty badawcze, które mają już realne odniesienie w postaci osiągnięcia naukowego (opisane poniżej jako publikacja H2 w Osiągnięciu 2) są wynikiem współpracy z ośrodkiem naukowym (University of Waterloo) kierowanym przez Pana Prof. Janusza Pawliszyna. Zagadnienia opisane w tym akapicie są warte głębszej uwagi i analizy oraz według mnie

mogłyby być dodatkowo przedyskutowane także podczas rozmowy z Kandydatem na posiedzeniu Komisji habilitacyjnej.

W życiorysie naukowym Kandydata do stopnia doktora habilitowanego można znaleźć także informację o kierowaniu projektami badawczymi (jako główny badacz, kierownik) w ramach projektów finansowanych ze źródeł zewnętrznych. Habilitant wskazuje na projekt finansowany poprzez programy: Opus (2x), Sonata-Bis i Preludium NCN, Team FNP i Juventus-Plus MNiSzW w latach 2010-2024. Wyniki uzyskane w trakcie realizacji tych grantów posłużyły do opublikowania publikacji w czasopismach z bazy *Journal Citation Reports*. Część publikacji wpisuje się w zaprezentowany cykl habilitacyjny i dowodzi sprawności badawczej i organizacyjnej Habilitanta.

Osiągnięcie habilitacyjne

Cykl publikacji Pana dr. n. chem. Pawła Nowaka, składający się na naukowe osiągnięcie habilitacyjne, posiada tytuł: „*Białe*” *spojrzenie na zieloną chemię analityczną – nowa teoria, narzędzia oceny, techniki i metodologie*”. Cykl obejmuje łącznie 9 publikacji, wypracowanych przez zespoły 2-5 współautorów lub – w dwóch przypadkach – jednoautorskie, w czasopismach rangi międzynarodowej i sumarycznym IF = 59,5. W przypadku wszystkich publikacji w cyklu prac Habilitant jest pierwszym autorem. Ponadto, jest On w ośmiu publikacjach autorem korespondującym. Spójny charakter osiągnięcia habilitacyjnego (skonstruowany na bazie trzech ściśle powiązanych cykli publikacyjnych), a także opisany w dokumentacji udział współautorów wraz z podpisanymi oświadczeniami, potwierdzają wiodącą rolę Pana dr. n. chem. Pawła Nowaka w zakresie formułowania koncepcji badawczej, wykonywania badań eksperymentalnych i opracowania wyników oraz podczas konstrukcji publikacji.

Cykl publikacji habilitacyjnych zawiera dobrze sformułowane oraz konsekwentnie realizowane zadania badawcze. Badania posiadają wymagany aspekt nowości naukowej oraz wnoszą zauważalny wkład w dziedzinie współczesnych nauk chemicznych, opierając się przy tym na nowoczesnej metodologii, ze szczególną koncentracją w obszarze podstaw teoretycznych tzw. zielonej i białej chemii oraz opracowania nowych narzędzi i metod analitycznych opartych na powyższej koncepcji. Habilitant skoncentrował się w pierwszym rzędzie na opracowaniu nowego podejścia teoretycznego tzw. „Zielonej Chemii Analitycznej” (z ang. Green Analytical Chemistry, GAC), która w ogólnym rozumieniu oznaczać ma ograniczenie niekorzystnego oddziaływania stosowanych metod analitycznych na środowisko naturalne oraz bezpieczeństwo użytkownika. Przedmiotem zainteresowań była potem także próba pogodzenia zieloności z innymi kryteriami decydującymi o funkcjonalności metody (kryteria analityczne i praktyczno-ekonomiczne), opracowanie brakujących elementów podstaw teoretycznych o uniwersalnym charakterze, a także udoskonalenie modeli pozwalających oceniać zieloność (i białość) metod analitycznych w prosty i wiarygodny sposób.

W pierwszym etapie badań, Habilitant przedstawił model RGB (z ang. Red-Green-Blue) jako nowe narzędzie całościowej oceny zieloności metod analitycznych zgodnie z koncepcją

„Zielonej Chemii Analitycznej” (GAC). W artykule przedstawiono ogólne reguły oceny i schemat postępowania nowej strategii, i omówiono ją na wybranych przykładach. Nowa koncepcja oceny zieloności została opublikowana w 2019 r. w czasopiśmie *Analytical Chemistry* (publikacja H1). Szczególny element nowości według mnie dotyczy tutaj faktu zaproponowania modelu, który jest obecnie jednym z głównych narzędzi oceny zieloności metod w chemii analitycznej. Zgadzam się z Habilitantem, że zaproponowane rozwiązania są interesujące z analitycznego punktu widzenia, w szczególności gdy celem jest całościowa ocena zieloności metody analitycznej. Bardzo cenny element roboczy pierwszego etapu badań był następnie powiązany z rozpoczęciem współpracy naukowej z prof. Januszem Pawliszynem, prezentując nową koncepcję oceny metod analitycznych, opartą na tzw. „Białej Chemii Analitycznej” (z ang. White Analytical Chemistry, WAC). Zgadzam się ze stwierdzeniem, że WAC jako rozszerzenie GAC umożliwia potencjalnie efektywną ocenę metod analitycznych opierając się nie tylko o aspekt zieloności, ale także włączając aspekty decydujące o funkcjonalności metody, czyli kryteria analityczne i praktyczno-ekonomiczne. WAC oznacza w skrócie celowe dążenie do uzyskania optymalnego kompromisu pomiędzy trzema często przeciwstawnymi atrybutami; i myślenia całościowego oraz postrzegania zieloności jako integralnego i nieodzownego elementu, który jednak nie może przysłańać cech funkcjonalnych decydujących o użyteczności. To podejście zostało opublikowane w 2021 r. w czasopiśmie *TrAC – Trends in Analytical Chemistry* (publikacja H2). Istotnym uzupełnieniem powyższych rozważań jest artykuł oryginalny porównujący dwie nowe metody analityczne oparte na wysokosprawnej chromatografii cieczowej (z ang. high performance liquid chromatography, HPLC) i elektroforezie kapilarnej (z ang. capillary electrophoresis, CE), pozwalające na rozdzielanie i efektywną analizę jakościową i ilościową wybranych barwników oraz konserwantów spożywczych. Potencjał zieloności opracowanych metod został oceniony i porównany za pomocą opracowanego wcześniej modelu RGB. Tym samym praca opublikowana w *Journal of Chromatography A* (publikacja H4) stanowi potwierdzenie użyteczności tego narzędzia oceny zieloności.

Dwie powyżej przedstawione publikacje (publikacja H1 i H4, z wyłączeniem publikacji H2) cyklu osiągnięcia habilitacyjnego (określonego w dokumentacji jako Osiągnięcie 2) posiadają łącznie 117 niezależnych cytowań (na podstawie przedłożonej dokumentacji).

Aby mogła być dalej rozwijana teoria zieloności w ujęciu jeszcze bardziej uniwersalnym, Habilitant zdecydował się na dalsze uzupełnienia, wydawałoby się już wyczerpujących, wcześniejszych rozważań opublikowanych w 2021 r. w czasopiśmie *TrAC – Trends in Analytical Chemistry* (publikacja H2). W ten sposób pojawiła się koncepcja opracowania nowej teorii zieloności od podstaw, którą nazwano „Zunifikowaną Teorią Zieloności” (z ang. Unified Greenness Theory). W związku z tym przedstawiono m.in., krytyczną analizę obecnej teorii zielonej chemii, nowe definicje kluczowych pojęć, pierwszy opis matematyczny głównych pojęć zieloności oraz nowy zbiór nadrzędnych reguł zielonej chemii. W kontekście dużej, twórczej oryginalności i pomysłowości można zinterpretować zaprezentowane wyniki badań opublikowane w 2023 r. w *Green Chemistry* (publikacja H3), artykułu oznaczony jako „hot” i umieszczonego w zbiorze „hot articles 2023”.

Dwie powyżej przedstawione publikacje cyklu osiągnięcia habilitacyjnego (określonego w dokumentacji jako Osiągnięcie 1) posiadają łącznie niebagatelną już w tej chwili liczbę 174

niezależnych cytowań (na podstawie przedłożonej dokumentacji), i wypracowane na ten moment głównie przez publikację H2.

Bardzo dobre kwalifikacje w obszarze chemii analitycznej, jak również wypracowany przez Pana dr. n. chem. Pawła Nowaka solidny warsztat w zakresie szczegółowej oceny teorii i koncepcji „zieloności” i „białości” metod analitycznych, znalazły potwierdzenie w ostatnim etapie badań tworzących cykl osiągnięcia habilitacyjnego, w którym rozważane są opracowanie i rozwój nowych technik badawczych i metodologii pomiarów, spójnych z koncepcjami GAC i WAC (publikacje H5-H9). Na podkreślenie zasługuje tutaj fakt, że przeprowadzone badania w pierwszym rzędzie potwierdziły możliwość połączenia ze sobą elektroforezy kapilarnej (z ang. capillary electrophoresis, CE) z mikroskalową termoforezą (z ang. microscale thermophoresis, MST) za pomocą kapilary krzemionkowej (wykorzystywanej w CE) tworząc technikę sprzężoną bezpośrednio (CE-MST). Ta koncepcja analityczna została opublikowana w 2018 r. w czasopiśmie *Analyst* (publikacja H5). W kolejnych pracach, po raz pierwszy użyta została najpierw samodzielnie technika MST do analizy właściwości kwasowo-zasadowych i wyznaczania wartości stałej kwasowości (pKa) (opublikowana w 2022 r. w czasopiśmie *Molecules* publikacja H6). Po czym, ten sam układ badawczy został zaimplementowany do systemu CE-MST i przedstawiona została metoda pozwalająca wyznaczyć powinowactwo układu molekularnego (w tym wypadku względem protonu) za pomocą nowej techniki CE-MST (opublikowana także w 2022 r. i także w czasopiśmie *Molecules* publikacja H7). Na uwagę zasługuje na koniec fakt próby zwrócenia uwagi przez Habilitanta na wcześniej opublikowane prace: porównanie szerokiego spektrum różnych alternatywnych typów kapilar ze zmodyfikowaną powierzchnią, pozwalających zminimalizować wahania przepływu elektroosmotycznego, a także pewne alternatywne kryteria identyfikacji pików w stosunku do czasów migracji (opublikowana w 2017 r. w czasopiśmie *Analytical and Bioanalytical Chemistry* publikacja H8) oraz podejścia korekcyjne, które powinny być stosowane w celu poprawy dokładności wyznaczania wartości ruchliwości elektroforetycznej, kluczowego parametru w wielu zastosowaniach CE, np. analizie powinowactw (opublikowana w 2017 r. w czasopiśmie *Analytical Chemistry* publikacja H9).

Powyżej przedstawione publikacje cyklu osiągnięcia habilitacyjnego (określonego w dokumentacji jako Osiągnięcie 3) posiadają łącznie 57 niezależnych cytowań (na podstawie przedłożonej dokumentacji).

W badaniach objętych cyklem prac osiągnięcia habilitacyjnego Pan dr n. chem. Paweł Nowak udowodnił dobre przygotowanie badawcze. Wykazał się umiejętnością stawiania istotnych poznawczo hipotez badawczych i zdolnością do racjonalnego, konsekwentnego planowania oraz systematycznej realizacji zaawansowanych prac teoretycznych i doświadczalnych, jak również sprawnością w zakresie raportowania wyników badań w uznanym piśmiennictwie specjalistycznym.

Osiągnięcia dydaktyczne, organizacyjne i popularyzatorskie

Pan dr n. chem. Paweł Nowak posiada dowody wskazujące na doświadczenie dydaktyczne (skoncentrowane zarówno na działalności organizacyjnej dotyczącej sfery dydaktycznej, jak i

zasadniczej aktywności dotyczącej prowadzenia zajęć dla studentów). Prowadzenie i koordynacja zajęć dla studentów dotyczy przy tym zarówno studentów polskojęzycznych, jak i anglojęzycznych. Habilitant jest promotorem pomocniczym w 1 wszczętym przewodzie doktorskim. Był On również kierownikiem łącznie 6 prac magisterskich (w tym jednej w trakcie realizacji). Akademię doświadczenie dydaktyczne Pana dr. n. chem. Pawła Nowaka zwięźczone jest współuczestnictwem w dwóch projektach dydaktycznych.

Pan dr n. chem. Paweł Nowak bierze udział w pracach organizacyjnych na rzecz środowiska akademickiego wspierając przedsięwzięcia na skalę uczelnianą i pozaucelnianą (Komitet Chemii Analitycznej PAN, komitety organizacyjne konferencji naukowych). Jest On także, jak wspomniano już powyżej, recenzentem 56 manuskryptów publikacji. Ponadto warto odnotować Jego popularyzatorską aktywność naukową podczas Festiwalu Nauki.

Podsumowanie

Jestem przekonany, że Pan dr n. chem. Paweł Nowak poprzez swoją dotychczasową działalność badawczą wnosi elementy nowości naukowej w obszarze chemii, w szczególności chemii analitycznych, korzystając z oryginalnie wypracowanej metodologii badawczej opartej na nowatorskich teoriach i koncepcjach. Uważam, że dorobek naukowy w postaci odnotowanych osiągnięć badawczych Habilitanta (ale także dodatkowe dowody pracy dydaktycznej i w zakresie organizacji pracy akademickiej i popularyzatorskiej) wypełniają oczekiwania stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Ostatecznie stwierdzam zatem, że kandydatura Pana dr. n. chem. Pawła Nowaka do stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne, jest uzasadniona.

Katedra i Zakład Chemii Farmaceutycznej
prof. dr hab. Tomasz Bączek

Kierownik