

UNIWERSYTET MIKOŁAJA KOPERNIKA



WYDZIAŁ CHEMII

87-100 Toruń, ul. Gagarina 7
tel. (056) 6114302, fax (056) 6542477

Toruń, 19.03.2015

Prof. dr hab. Andrzej Wojtczak
Wydział Chemii UMK
87-100 Toruń,
Gagarina 7
e-mail: awojt@chem.umk.pl

Recenzja osiągnięcia naukowego zatytułowanego
„Strukturalne i elektronowe aspekty oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych w
związkach organicznych o potencjalnych właściwościach biologicznych”
oraz ocena aktywności naukowej
stanowiących podstawę w procedurze habilitacyjnej dr Magdaleny Małeckiej
prowadzonej na Wydziale Chemii Uniwersytetu Łódzkiego

Wstęp

Przedstawione do oceny osiągnięcie naukowe w formie cyklu publikacji wyczerpuje definicję zawartą w Art. 16. ust. 2, a dostarczona dokumentacja jest zgodna z wymogami określonymi w obowiązującej ustawie o stopniach i tytule naukowym.

Pani dr Magdalena Małecka ukończyła studia na Wydziale Matematyczno-Fizyczno-Chemicznym Uniwersytetu Łódzkiego w 1987 roku. W 1999 r. Habilitantka uzyskała stopień naukowy doktora nauk chemicznych ze specjalizacją krystalografia na Wydziale Matematyczno-Fizyczno-Chemicznym Uniwersytetu Łódzkiego. Należy podkreślić, że praca doktorska kandydatki była związana z badaniami kompleksów miedzi (II) z fenyłowymi pochodnymi pirazolu, różniąc się zdecydowanie od tematyki ocenianego tu osiągnięcia naukowego. Od 1999 dr Małecka jest zatrudniona na Uniwersytecie Łódzkim na stanowisku adiunkta w Katedrze Krystalografii i Krystalochemii, obecnie w Katedrze Chemii Teoretycznej i Strukturalnej UŁ. Zgodnie z Autoreferatem, w 2012 roku zostało wszczęte w starym trybie postępowanie habilitacyjne dr Małeckiej. Na wniosek Habilitantki zostało ono umorzono w celu uzupełnienia wniosku zgodnie z sugestią jednego z recenzentów. W umorzonym postępowaniu trzy recenzje były pozytywne a jedna negatywna.

1. Ocena osiągnięć naukowo-badawczych i wkładu w aktualny stan wiedzy

Na przedstawiony do oceny dorobek będący podstawą procedury habilitacyjnej składa się 12 prac H1-H12, opublikowanych w latach 2001-2014 w czasopiśmie z listy JCR. Ich IF waha się od

analizie topologicznej oraz stosując tzw. funkcję źródła. Analiza wykazała, że w przypadku 3 pochodnych chromonu wewnątrzcząsteczkowe wiązania wodorowe należą do typu RAHB, a w przypadku zbadanego oksafosfinianu wiązanie można zakwalifikować jako izolowane (IHB).

Habilitantka poszukiwała też dobrych deskryptorów pozwalających klasyfikować wiązania wodorowe. W tym celu określiła strukturę krystaliczną związku zawierającego sąsiadujące ze sobą wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe. Na jej podstawie zaproponowała oraz zbadała 6 układów modelowych, prowadząc analizę QTAIM, funkcji źródła, indeksu lokalizacji elektronów (ELI) i indeksu delokalizacji (δ). Kandydatka przeprowadziła też analizę oddziaływań międzycząsteczkowych w strukturach badanych związków wykazując, że istnieje korelacja między procentowym udziałem oddziaływań C...H w powierzchni Hirshfelda a logP będącym miarą lipofilowości związków.

Wybrany przez Habilitantkę obszar badań jest trudny ze względu na obszerną bazę literaturowych doniesień eksperymentalnych i teoretycznych, dotyczących opisu wiązań wodorowych. Spośród przedstawionych w Autoreferacie, za najważniejsze osiągnięcia badawcze Habilitantki w zakresie ocenianego osiągnięcia naukowego uważam:

- umiejętne połączenie badań strukturalnych, określenia eksperymentalnego rozkładu gęstości elektronowej, obliczeń teoretycznych i analizy topologicznej do analizy wiązań wodorowych w wybranych układach.
- przenaszalność własności atomowych dla poszczególnych atomów, lokalizowanych w określonym otoczeniu chemicznym, użyteczna dla tworzenia baz danych własności atomowych
- stwierdzenie użyteczności indeksu lokalizacji elektronów (ELI), indeksu delokalizacji (δ), parametrów topologicznych z teorii QTAIM oraz funkcji źródła do opisu delokalizacji elektronów π w pierścieniach chelatowych.

Po zapoznaniu się dokumentacją ocenianego osiągnięcia naukowego mogę stwierdzić, że dorobek naukowy dr Magdaleny Małeckiej ma dobre współczynniki naukometryczne i jest dobry jakościowo. W mojej opinii spełnia on podstawowe wymagania do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego.

Na koniec 2 uwagi do Autoreferatu. Na str 10 Habilitantka mówi o „podstawniku etoksylowym” lecz z opisu Schematu 2 wynika, że to raczej podstawnik hydroksyetylowy. Na str. 11 jest nieprecyzyjne sformułowanie sugerujące istnienie wiązań wodorowych $\pi\dots\pi$

2. Ocena ogólnego dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego oraz współpracy międzynarodowej Habilitantki

Dorobek Habilitantki, prawie w całości powstały po uzyskaniu przez nią stopnia doktora, to 57 publikacji w czasopismach z listy JCR w tym 3 prace przed doktoratem. Sumaryczny IF 72.884 (dla prac przed doktoratem IF = 1,070). Średnia IF na publikację około 1.28 oznacza, że prace Habilitantki publikowane są w dobrych czasopismach, szczególnie, że 13 z nich to raporty strukturalne w Acta Crystallographica E. Publikacje Kandydatki znalazły oddźwięk w społeczności naukowej, gdyż są cytowane 331 razy (bez autocytowań), indeks Hirsha wynosi 12. Takie parametry dorobku są bardzo dobre jak na ten etap kariery naukowej. Należy zauważyć, że w publikacjach współautorstwa Kandydatki z ogólnego dorobku (poza listą H1-H12), jest ona autorem korespondującym w 11 pracach. Na podkreślenie zasługuje też fakt rosnącej rangi czasopism (IF

nowych prac 2.4 do 4.7) i intensyfikacja aktywności badawczej – w okresie 2013-2014 ukazało się 7 prac Habilitantki (suma IF prawie 14).

Głównym obszarem zainteresowań Kandydatki były badania strukturalne pochodnych chromonu i oksafosfinianu. Autorkę interesowały wewnątrzcząsteczkowe wiązania wodorowe N-H...O obserwowane w badanych związkach. Prowadząc analizę topologiczną w oparciu o teorię QTAIM Kandydatka wykazała, że te wiązania wodorowe są wspomagane rezonansem oraz że istnieje korelacja pomiędzy geometrycznymi parametrami wiązania wodorowego a gęstością elektronową w punkcie krytycznym wiązania charakterystyczną dla danego wiązania. Badania strukturalne Kandydatki wskazały na występowanie w obu grupach związków dwóch form tautomerycznych. Przeprowadzona analiza wykazała, że wewnątrzcząsteczkowe wiązania wodorowe wspomagane rezonansem typu N-H...O są bardziej stabilne niż wiązania typu O-H...N. Habilitantka wykazała istnienie zależności między parametrami energetycznymi a odległością kontaktu H...A, oraz pomiędzy gęstością elektronową w punkcie krytycznym pierścienia i gęstością elektronową oddziaływania H...A. Na podstawie swoich wyników Kandydatka wskazała, że eliptyczność wiązań może być skutecznym narzędziem stwierdzenia delokalizacji elektronów π w pierścieniu chelatowym badanych związków.

Kolejny obszar zainteresowań Habilitantki to wyznaczanie eksperymentalnego rozkładu gęstości elektronowej dla wiązań wodorowych i słabych oddziaływań. Badania te Habilitantka prowadzi z użyciem danych uzyskanych z wysokorozdzielczych synchrotronowych eksperymentów dyfrakcyjnych. Dla klasyfikowania analizowanych oddziaływań Kandydatka posługiwała się funkcją źródła i określeniem udziałów atomowych w gęstości elektronowej punktu krytycznego wiązania wodorowego.

Autoreferat oraz lista publikacji Dr Małeckiej wskazują, że współpracuje ona z badaczami z kilku grup, prowadząc badania strukturalne oraz obliczenia kwantowo-chemiczne dla różnych związków organicznych oraz tym kompleksów Pd(II), Pt(II) i Cu(II) o potencjalnej aktywności przeciwnowotworowej. W szczególności istotną część dorobku Habilitantki stanowią publikacje powstałe w rezultacie współpracy z Panią prof. Elżbietą Budzisz z Uniwersytetu Medycznego w Łodzi, dotyczące badań strukturalnych innych związków organicznych oraz kompleksów o spodziewanej aktywności biologicznej i przeciwnowotworowej. (8 publikacji spoza listy H1-H12). Dr Małeczka rozwija też współpracę z dr Bogumiłą Kupcewicz z Collegium Medicum UMK w Bydgoszczy, poszukując zależności pomiędzy strukturą krystaliczną i elektronową a cytotoksycznością i fluorescencją w stanie stałym związków organicznych o potencjalnych właściwościach biologicznych. Wśród współpracujących badaczy Kandydatka wymienia zespoły prof. Janusza Zakrzewskiego i prof. Justyna Ochockiego z macierzystego UŁ, prof. Krzysztofa Kostki i prof. Aleksandra Kufelnickiego z Uniwersytetu Medycznego w Łodzi, oraz prof. Wernera Massa z Philipps-University, (Marburg, Niemcy), prof. Sandera van Smaalen, University of Bayreuth, i dr Carstena Paulmann i dr Wolfganga Morgenroth z Hasylab/DESY (Hamburg). Owocna współpraca z eksperymentatorami z obszaru badań medycznych i farmaceutycznych wskazuje, że Kandydatka jest cenionym członkiem grup badawczych. Otwartość na szeroką gamę tematów badawczych i umiejętność współpracy to istotne cechy, których oczekuje się od samodzielnych pracowników naukowych.

Uczestnictwo w programach badawczych, konsorcjach i sieciach badawczych; kierowanie projektami badawczymi;

Habilitantka wykazuje zaangażowanie w projektach badawczych finansowanych ze źródeł zewnętrznych. Na realizację swoich badań zyskała trzykrotnie granty pomiarowe w laboratorium Hasylab/DESY, Hamburg, Niemcy w okresie 2007-2012. W ostatnim z tych grantów dr Małeczka

jest kierownikiem i wykonawcą. Dr Małecka była też wykonawcą projektu KBN finansowanego w latach 2004-2007.

Udział w konferencjach naukowych lub w komitetach organizacyjnych konferencji;

W dorobku Habilitantki są 10 referatów na zaproszenie z czego jeden na konferencji za granicą, 3 referaty w University of Bayreuth, Laboratory of Crystallography, 2 na konferencjach krajowych oraz 4 w krajowych ośrodkach badawczych. Habilitantka prezentowała też 50 posterów na konferencjach naukowych, z tego 48 po uzyskaniu stopnia doktora. Bardziej precyzyjnego podziału nie mogę dokonać, gdyż brak tej informacji w zestawieniu dorobku.

Habilitantka zaznaczyła swój udział w pracy organizacyjnej na rzecz swojego Wydziału, pracując w Komisji Rekrutacyjnej na kierunek Chemia (2005) oraz w Komisji Dydaktycznej Wydziału (2001-2008).

Nagrody i wyróżnienia;

Dr Małecka była kilkakrotnie nagradzana za działalność naukową. Kandydatka w 2005 roku jako członek zespołu uzyskała nagrodę Ministra Zdrowia za cykl publikacji, oraz była w zespole nagrodzonym za cykl publikacji przez Rektora UŁ (3-krotnie) i przez Rektora Uniwersytetu Medycznego w Łodzi (2-krotnie).

Osiągnięcia dydaktyczne, popularyzacja nauki, opieka nad studentami i doktorantami

W latach 1998-2014 Habilitantka opiekowała się 23 pracami magisterskimi.

Kandydatka ma duże doświadczenie dydaktyczne. Dr Małecka prowadzi wykłady kursowe z krystalografii dla studentów chemii II-go stopnia studiów stacjonarnych i niestacjonarnych oraz wykład do wyboru po angielsku „*Modern Structural Chemistry*” dla studentów II-go stopnia chemii. Habilitantka prowadziła lub prowadzi szereg zajęć laboratoryjnych i konwersatoria z krystalografii, chemii teoretycznej i chemii organicznej, a także zajęcia specjalizacyjne z krystalografii.

Habilitantka wykazała się aktywnością w popularyzacji nauki. Przeprowadziła 2 pokazy dla uczniów gimnazjum i liceum („Od kryształu do struktury” 2004 i „Kolorowa chemia” 2010).

Staże w ośrodkach naukowych lub akademickich;

Po doktoracie Habilitantka podnosiła swoje kwalifikacje na 4-miesięcznym stażu naukowym w Zakładzie Krystalografii Uniwersytetu Adama Mickiewicza (2002 r.). Odbyła też kilka krótkoterminowych wyjazdów badawczych do Central X-ray Laboratory, Marburg (2003 r., DAAD - grant badawczy, 2 miesiące), University of Bayreuth, Laboratory of Crystallography (2008 r., DAAD – grant badawczy, 2 miesiące; 2012 r., DFG – grant badawczy, 4 miesiące). W latach 2007-2012 Kandydatka była na 9 wyjazdach badawczych w Hasylab/DESY, dla przeprowadzenia pomiarów w ośrodku synchrotronowym w sumie 72 dni).

Recenzowanie projektów badawczych oraz publikacji w czasopismach

Dr Małecka jest rozpoznawana na trudnym obszarze badań wiązań wodorowych. Habilitantka była recenzentem 16 publikacji dla dobrych czasopism z listy JCR, m.in. *New Journal of Chemistry*, *CrystEngComm*, *Structural Chemistry*, *Crystal Growth & Design*.

W dokumentacji nie znalazłem informacji o tym, czy Kandydatka była recenzentem projektów badawczych.

Wniosek końcowy

Na podstawie wnikliwej analizy przedłożonego osiągnięcia naukowego zatytułowanego „Strukturalne i elektronowe aspekty oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych w związkach organicznych o potencjalnych właściwościach biologicznych” oraz osiągnięć w aktywności naukowej, dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzatorskiej będących podstawą procedury habilitacyjnej stwierdzam, że Pani dr Magdalena Małecka spełnia zarówno zwyczajowe jak i formalne wymogi stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych określone w Ustawie z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym (Dz. U. nr 65, poz. 595 ze zm. w Dz. U. z 2005r. nr 164, poz. 1365, Dz. U. z 2011r., nr 84 poz. 455, Dz.U. z 2014 poz. 1198). Na tej podstawie popieram wniosek do Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Łódzkiego o nadanie dr Magdalenie Małeckiej stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych.

Toruń, dnia 19 marca 2015 r.

Prof. dr hab. Andrzej Wojtczak