



Katedra Chemii Organicznej Wydział Chemii Uniwersytetu Łódzkiego

ul. Tamka 12, 91-403 Łódź
tel: (4842)6784731, fax.: (4842)6786583,
e-mail: kchemorg@uni.lodz.pl., <http://www.chem.uni.lodz.pl>

Prof. dr hab. Janusz Zakrzewski

Łódź, 29. 10. 2012.

Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr. inż. Borysa Ośmiałowskiego pt. „Efekty steryczne i słabe oddziaływania drugiego rzędu w asocjacji związków heterocyklicznych”

Dr inż. Borys Ośmiałowski jest absolwentem Uniwersytetu Technologiczno-Przyrodniczego (dawnej Akademii Techniczno-Rolniczej) w Bydgoszczy. Studia ukończył w 1997 r. i rozpoczął pracę na etacie asystenta w Zakładzie Chemii Organicznej Katedry Fizykochemii i Technologii Związków Organicznych tej uczelni. Pracę doktorską pt. „Tautomeria 2-fenacylopirydyn: wpływ podstawnika i temperatury na równowagę przeniesienia protonu” wykonał po pod kierunkiem prof. dr. hab. Ryszarda Gawineckiego i obronił w 2003 r. W czasie przygotowywania pracy doktorskiej (2001 i 2002 r.), uzyskał stypendium Fundacji na rzecz Nauki Polskiej dla młodych naukowców (program START). W pracy doktorskiej Habilitant wykazał się głęboką znajomością metod spektroskopowych (NMR, UV-Vis, IR), a także obliczeniowych (DFT). Wiedzę i doświadczenie w zakresie tych ostatnich miał okazję uzyskać w czasie stażu naukowego w Uniwersytecie w Grazu w grupie prof. W. Fabiana, gdzie prowadził obliczenia kwantowo-mechaniczne dla równowag tautomerycznych. W okresie przed uzyskaniem stopnia doktora Habilitant uzyskał już znaczny dorobek naukowy, liczący 18 publikacji w dobrych czasopismach.

Za duży sukces Habilitanta należy uznać uzyskanie stypendium Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej w ramach programu KOLUMB 2004, który umożliwił mu odbycie stażu post-doktorskiego w Instytucie Chemii Organicznej Uniwersytetu w Zurichu (2005-2006). W ramach tego stażu, pracując w grupach prof. K. Baldrige'a i J. S. Siegela, zdobył dalsze doświadczenia dotyczące zarówno metod obliczeniowych jak i eksperymentalnych. Staż ten jednak nie zaowocował wspólnymi publikacjami.

Rozprawę habilitacyjną dr inż. Borysa Ośmiałowskiego stanowi cykl 12 prac opublikowanych w latach 2009-2012 w dobrych i bardzo dobrych czasopismach chemicznych o cyrkulacji międzynarodowej (J. Org. Chem., J. Phys. Chem. A, J. Mol. Struct., J. Mol. Mod., Supramol. Chem. i Struct. Chem.) o sumarycznym współczynniku wpływu $IF = 24,61$. Wśród przedstawionych publikacji są trzy prace monoautorskie a pozostałość stanowią prace zespołowe, których współautorami jest duża grupa chemików fińskich, R. Gawinecki, R. Dobosz i M. Kowalska. W załączonych oświadczeniach wszyscy współautorzy z wyjątkiem R. Gawineckiego (który jest współautorem 3 prac), określają swój wkład jako ograniczony do wykonania określonych pomiarów fizykochemicznych lub obliczeń, z czego wnioskuję, że Habilitant jest ich głównym autorem. Wniosek ten potwierdza fakt, że we **wszystkich** publikacjach Habilitant jest „autorem korespondencyjnym”, co wskazuje na jego dominujący wkład do tych prac. Wkład ten, wyliczony na podstawie w/w oświadczeń jest zawarty w granicach 45-85%. W świetle powyższego, odmowa R. Gawineckiego określenia swojego wkładu do przedstawionych jako rozprawa habilitacyjna publikacjach jest dla mnie zupełnie niezrozumiała.

Tematyka prac wchodzących w zakres rozprawy habilitacyjnej obejmuje zagadnienia z zakresu fizycznej chemii organicznej, a mianowicie wpływ efektów sterycznych oraz tzw. oddziaływań drugiego rzędu (*secondary interactions*) na asocjację szeregu pochodnych 1,8-naftyrydiny i pirydiny zawierających w położeniach 2,7 (naftyrydiny) lub 2,5 (pirydiny) podstawniki będące donorami i akceptorami wiązań wodorowych, oraz wykazujące równowagi tautomeryczne. Autor koncentrował się na homoasocjacji tych związków, oraz ich heteroasocjacji z odpowiednio dobranymi partnerami mającymi komplementarny układ donorowo-akceptorowy (cykliczne imidy, 2,2'-dipirydyloamina). W rezultacie oddziaływań takich związków tworzyły się asocjaty zawierające 3-4 międzycząsteczkowe wiązania wodorowe, i szereg oddziaływań drugiego rzędu, w których przy odpowiednim podstawieniu mogły zachodzić zmiany tautomeryczne w partnerach. Tematyka podjętych przez Habilitanta badań jest ciekawa i istotna ze względu na możliwość głębszego poznania czynników wpływających na asocjację związków tworzących kilka wiązań wodorowych (co często obserwuje się w układach biologicznych), oraz na możliwość racjonalnego wpływu na taką asocjację co może mieć zastosowanie w chemii supramolekularnej (np. w projektowaniu polimerów niekonwalencyjnych czy inżynierii kryształów). Głównymi narzędziami, jakie stosował w swych badaniach Habilitant była spektroskopia NMR (w roztworze i w ciele stałym), spektrometria mas, rentgenografia, oraz metody obliczeniowe (DFT). W rezultacie stosowania tych technik uzyskał szereg istotnych informacji dotyczących stałych asocjacji

oraz struktury asocjacji związków uznawanych za tzw. syntony supramolekularne, szeroko wykorzystywanych w tworzeniu struktur supramolekularnych

Przedstawiona powyżej analiza wyników naukowych opisanych w publikacjach wchodzących w zakres recenzowanej rozprawy habilitacyjnej wskazuje na znaczny i oryginalny dorobek naukowy Habilitanta w zakresie badań czynników wpływających na asocjację poprzez wiązania wodorowe i tworzenie struktur supramolekularnych odpowiednio wyselekcjonowanych związków heterocyklicznych. Na podkreślenie zasługuje również fakt, iż Habilitant potrafił zainteresować tą tematyką grupę badaczy fińskich, którzy pomogli mu w rozwiązaniu szeregu szczegółowych problemów.

Ogólny dorobek naukowy Habilitanta jest więcej niż znaczący. Liczy on, oprócz 12 prac wchodzących w zakres rozprawy habilitacyjnej, 46 publikacji opublikowanych w czasopiśmie międzynarodowym z tzw. listy filadelfijskiej. Prace te były cytowane (bez autocytowań) 380 razy, a współczynnik Hirsha wynosi 12 (według Autoreferatu).

Bardzo pozytywnie oceniam aktywność Habilitanta w zdobywaniu środków finansowych na badania naukowe (kierownictwo Grantu wspomagającego FNP oraz dwóch grantów NCN, uczestnictwo w charakterze wykonawcy w czterech innych grantach).

W przedstawionych mi do recenzji materiałach nie znalazłem natomiast informacji dotyczącej działalności dydaktycznej Habilitanta. Dowiedziałem się jedynie, że był on promotorem 15. zakończonych prac magisterskich. Pozostaje przypuszczać, że pracując na etacie adiunkta wypełnia przewidziane pensum dydaktyczne, obejmujące zajęcia laboratoryjne, seminaria i konwersatoria a być może wykłady?

Charakterystyka działalności zawodowej Habilitanta byłaby niepełna bez wymienienia jego aktywności w Klubie Stypendystów FNP, którego przez dwa lata był prezesem, autorstwa rozdziału w pracy zbiorowej „Kryzysy – przekłete czy pożądane” na zaproszenie tygodnika POLITYKA, współorganizacja konferencji „Correlation Analysis in Chemistry” (Borówno 2001), oraz recenzje publikacji i projektów badawczych dla FNP).

Reasumując, stwierdzam, że dr inż. Borys Ośmiałowski uzyskał znaczny i oryginalny dorobek naukowy dotyczący wpływu podstawników i oddziaływań drugiego rzędu na asocjację związków heterocyklicznych mogących tworzyć kilka wiązań wodorowych. Dorobek ten opublikował w formie monotematycznego cyklu 12. artykułów naukowych, który przedstawił jako rozprawę habilitacyjną. Habilitant jest również współautorem 46 publikacji naukowych, nie wchodzących w zakres rozprawy habilitacyjnej. Ma duże osiągnięcia organizacyjne w zakresie zdobywania środków finansowych na badania, oraz

proceeds with fruitful international cooperation. I am convinced that his application for the award of a doctoral habilitation degree is fully justified. I support this application.

J. Zelin