



Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak
Wydział Chemii
Uniwersytet Warszawski
ul. Pasteura 1, 02 093 Warszawa

Warszawa, 05/11/2016r.

**OPINIA DOTYCZĄCA ROZPRAWY HABILITACYJNEJ
PANI DR LILIANNY CHĘCIŃSKIEJ Z KATEDRY CHEMII TEORETYCZNEJ I
STRUKTURALNEJ WYDZIAŁU CHEMII UNIwersYTETU ŁÓDZKIEGO
ZATYTUŁOWANEJ: „CHARAKTERYSTYKA WIĄZAŃ CHEMICZNYCH I
ODDZIAŁYWAŃ NIEKOWALENCYJNYCH W OPARCIU O TEORETYCZNY I/LUB
EKSPERYMENTALNY ROZKŁAD GĘSTOŚCI ELEKTRONOWEJ”**

Po szczegółowym zapoznaniu się z przesłaną mi dokumentacją dotyczącą ewentualnego nadania dr Liliannie Chęcińskiej z Katedry Chemii Teoretycznej i Strukturalnej Wydziału Chemii Uniwersytetu Łódzkiego stopnia naukowego doktora habilitowanego, oświadczam, że znam kandydatkę jedynie z okazjonalnych kontaktów konferencyjnych. Oświadczam także, że z dr Chęcińską nie współpracowałem w żadnym wspólnym projekcie naukowym, i nie mam z nią żadnego, ani pozytywnego ani negatywnego, konfliktu interesów.

Zapoznałem się również z naszą ułomną ustawą z dnia 14 marca 2003r. „O Stopniach Naukowych i Tytule Naukowym” (Dz. U. nr 65/03 poz. 595 ze zm. Dz. U. z 2005 r. nr 164, poz. 1365 włącznie z nowelizacją z dnia 18 marca 2011 r. - Dz. U. Nr 84, poz. 455, z późn.zm. oraz z nowelizacją z dnia 11 lipca 2014 r. - Dz.U. poz. 1198),) i znam tryb ich przyznawania. Zapoznałem się również z Rozporządzeniem Prezesa Rady Ministrów z dnia 15/01/2004r. w sprawie szczegółowego trybu przeprowadzania czynności w przewodach doktorskich i habilitacyjnych, oraz postępowaniu o nadanie tytułu naukowego (Dz. U. Nr 15/04 poz. 128 z późn. zmianami w tym rozporządzeniach wykonawczymi do ustawy znowelizowanej w 2011r. oraz z komunikatem nr 2/2012), oraz z wytycznymi Centralnej Komisji ds. Stopni Naukowych i Tytułów dotyczącymi zarówno oceny aktywności naukowej kandydatów jak i spraw proceduralnych związanych z awansami. Zapoznałem się także z nowymi rozwiązaniami ustawowymi aktualnie obowiązującymi, z Rozporządzeniem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 30 października 2015 r. (dz. U. 2015, poz. 1842 z dnia 10 listopada 2015 r.), które niestety systemowo osłabiają nawet te skromne oczekiwania merytoryczne obowiązujące w poprzednich wersjach Ustawy. Uważam, że eliminacja kolokwium habilitacyjnego była błędem, a głosowanie na radach wydziału i radach naukowych za przyznaniem stopnia doktora habilitowanego bez bezpośredniego kontaktu członków danej rady z osobą habilitowaną jest systemowo nieuczciwe i powinno być jak najszybciej zlikwidowane. Deklaruję, że - moim zdaniem - jestem w stanie napisać bezstronną opinię dotyczącą rozprawy habilitacyjnej dr Lilianny Chęcińskiej mimo moich zastrzeżeń do obecnej wersji tej procedury.

1. Podstawowe dane o Habilitantce

Pani dr Lilianna Chęcińska urodziła się 24 stycznia 1975 roku w Łęczycy. Swoją dotychczasową karierę naukową związała z Katedrą Chemii Teoretycznej i Strukturalnej na Wydziale Chemii Uniwersytetu Łódzkiego, gdzie Pani Lilianna studiowała i uzyskała dyplom magistra chemii w 1999r. i w maju 2003r. uzyskała stopień doktora nauk chemicznych broniąc swoją pracę doktorską zatytułowaną: „Struktura cząsteczek i kryształów nowych pochodnych N,N'-podstawionego fosfonylowanego tiomocznika” wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Marii Bukowskiej-Strzyżewskiej (Politechnika Łódzka). Obecna habilitantka pracowała w Katedrze

Chemii Teoretycznej i Strukturalnej na Wydziale Chemii Uniwersytetu Łódzkiego najpierw jako asystentka (lata 2002-2003), a następnie jako adiunkt (od 2003r.).

Pani Lilianna w trakcie swojej dotychczasowej kariery odbyła kilka staży zagranicznych, w tym od września 2005r. do kwietnia 2006r. przebywała w grupie badawczej Prof. Petera Lugera w Institute of Chemistry, Biochemistry & Crystallography, Free University, Berlin, Niemcy; od 1-go stycznia do 28 lutego 2014 w grupie badawcza prof. Jensa Beckmanna w Institute of Inorganic and Physical Chemistry, Bremen University, Niemcy (stypendium DAAD); od 1 czerwca do 31 lipca 2010 w grupie dr Birgera Dittricha w Institute of Inorganic Chemistry, University of Göttingen, Niemcy oraz w latach 2006-2012 spędziła w sumie 56 dni na synchrotronie Hasylab/DESY w Hamburgu wykonując swoje pomiary w ramach grantów pomiarowych.

2. Działalność dydaktyczna

Pani dr Chęcińska prowadziła dosyć szeroką działalność dydaktyczną przedstawiając 6 seminariów z uprawianej działalności naukowej, była promotorem lub opiekunem 6-ciu prac licencjackich i 9-ciu prac magisterskich, prowadziła zajęcia laboratoryjne, seminaria, konwersatoria, wykład kursowy z krystalografii, wykład monograficzny, wykład specjalnościowy, współprowadziła wykład specjalizacyjny, seminarium dyplomowe i inne zajęcia dydaktyczne. Także recenzowała liczne prace licencjackie i magisterskie. Nie mam żadnej wątpliwości, że dr Chęcińska ma duże doświadczenie dydaktyczne skutecznie potwierdzone licznymi zajęciami, które prowadziła w minionych latach.

3. Dorobek naukowy

W kategoriach formalnych parametrów scientometrycznych dorobek naukowy dr Lilianny Chęcińskiej to $8+27 = 35$ publikacji (w tym 8 wchodzących w skład habilitacji). Są w tym również 3 prace opublikowane przed uzyskaniem stopnia doktora. Oprócz tego, Pani dr Chęcińska opublikowała 7 komunikatów strukturalnych w Acta Cryst. E i cieszę się, że wyodrębniła te prace w osobną kategorię prac, do której to kategorii powinna także zaliczyć 5 komunikatów strukturalnych w Acta Cryst. C. Prace powyższe opublikowane są w czasopismach o całkowitym czynniku wpływu $26+62 = 88$. Uzyskały 320 cytowań obcych. Całkowity indeks Hirscha dr Chęcińskiej wynosi 11. Ponadto, dr Chęcińska miała 2 ustne wystąpienia na konferencjach naukowych i była współautorem 6 innych ustnych prezentacji konferencyjnych oraz uczestniczyła i prezentowała swoje wyniki w formie posterów na ok. 44 innych konferencjach naukowych. Dr Chęcińska miała co najmniej 3 granty pomiarowe na synchrotronie Hasylab/DESY w Hamburg (Niemcy) oraz kierowała 3 innymi grantami (NCN, KBN oraz Cyfronet). Recenzowała także prace dla różnych czasopism w tym dla J. Mol. Struct., CrystEngComm i Crystal Growth and Design. Podsumowałbym, że może nie jest to dorobek wybitny ale jest to mniej więcej oczekiwany dorobek od osoby starającej się o habilitację. Widziałem wiele aplikacji habilitacyjnych ze znacznie mniejszym dorobkiem.

Wśród prac przedstawionych jako osiągnięcie habilitacyjne wyróżnia się praca w Chemical Communications (2007) 4003-4005, ale także pozostałe prace opublikowane zostały w bardzo przyzwoitych czasopismach naukowych takich jak: Chemical Physics, Organic & Biomolecular Chemistry, Carbohydrate Research, Acta Crystallographica B, CrystEngComm, ChemPhysChem i Molecules. Wśród prac nie wchodzących do habilitacji dominują publikacje w Acta Crystallographica C (5x), Journal of Physical Organic Chemistry, Tetrahedron, Acta Crystallographica B (2x), Inorganica Chimica Acta, Die Pharmazie, Polyhedron, Structural Chemistry, Journal of Chemical Crystallography, Journal of Organometallic Chemistry, Molecules + 7 komunikatów w Acta Cryst. E.

Wśród tych dodatkowych publikacji można znaleźć publikacje w: Journal of Physical Chemistry A (2x), Journal of Inorganic Biochemistry, European Journal of Organic Chemistry, Dalton Trans. (2x), Crystal Growth & Design, ChemMedChem, Organometallics, Inorganic Chemistry, New Journal of Chemistry - jak wszyscy wiemy szczególnie ta ostatnia grupa czasopism to bardzo poważne czasopisma naukowe.

Przedstawione materiały zawierają wszystkie niezbędne informacje konieczne do oceny dorobku naukowego włącznie z deklaracjami współautorów dotyczącymi ich udziałów w publikacjach wchodzących w osiągnięcia naukowego przedstawionego jako podstawa habilitacji.

Habilitantka także szczegółowo opisała swój udział w zgłoszonych publikacjach i powiedziałbym, że przedstawione oszacowania współautorstwa brzmią racjonalnie i rozsądnie.

W mojej opinii dr Lilianna Chęcińska ma dosyć istotny dorobek publikacyjny opublikowany w zdecydowanej większości w liczących się czasopismach naukowych. Może brakuje kilku prac w tych czasopismach z „górnego półki” takich jak JACS czy Angewandte (tylko jedna praca) ale w tych dwóch powyższych czasopismach publikacje z Polski to ciągle duża rzadkość.

Pani Lilianna Chęcińska zainteresowała się badaniami krystalograficznymi w trakcie swoich studiów chemicznych częściowo wykonywanych także na Politechnice Łódzkiej pod kierunkiem prof. dr hab. Marii Bukowskiej - Strzyżewskiej. Z drugiej strony swoje zainteresowania obliczeniami kwantowomechanicznymi rozwijała pod kierunkiem prof. Sławomira Grabowskiego, który niestety po krótkim pobycie na Wydziale Chemii UŁ zostawił swoją grupę badawczą i przeniósł się do Hiszpanii. Miało to swoje negatywne konsekwencje dla sporej grupy młodych entuzjastów krystalografii i metod teoretycznych skupionych w jednostce kierowanej przez prof. Grabowskiego znacznie wydłużając ścieżki rozwoju tych młodych osób. Jedną z najgorszych konsekwencji odejścia prof. Grabowskiego była rezygnacja przez Wydział Chemii UŁ z przyznanej już aparatury rentgenowskiej. Szkoda, ponieważ takie osoby jak dr Lilianna Chęcińska, czy też dr hab. M. Małecka, mogły być wykonać swoje habilitacje znacznie wcześniej oraz mogły mieć bazę aparaturową na miejscu w Łodzi. Nie mniej reakcja dr Lilianny Chęcińskiej na sytuację w jakiej się znalazła była jak najbardziej prawidłowa. Mianowicie dr Chęcińska udała się na staż do bardzo mocnej grupy krystalograficznej Prof. Petera Lugera na Wolnym Uniwersytecie w Berlinie. I tam właśnie dr Chęcińska poznała metody multipolowego udokładnienia eksperymentalnej gęstości elektronowej (prace H2-H4). Kontakty nawiązane w Berlinie umożliwiły dr Chęcińskiej kontynuowanie ambitnych projektów na pograniczy krystalografii i chemii kwantowej poprzez uzyskanie kilku grantów pomiarowych na synchrotronie DESY w Hamburgu. Pomiar synchrotronowy był podstawą kolejnych prac dr Chęcińskiej, czyli prac H5 i H6. Następne wizyty w bardzo dobrych labach w Niemczech (Uniwersytety w Getyndze i Bremie) umożliwiły dr Chęcińskiej uzyskanie ciekawych wyników teoretycznych, które znalazły się w pracach H7 i H8.

Jak pisze dr Chęcińska w przesłanych mi do oceny Materiałach (cytuje): „...moja działalność naukowa po osiągnięciu stopnia doktora nauk chemicznych od 2003 roku jest związana z eksperymentalnym i teoretycznym rozkładem gęstości elektronowej związków organicznych. Głównym celem wszystkich prac w tym zakresie jest interpretacja charakteru wiązań chemicznych i zgłębienie natury oddziaływań niekowalencyjnych.” Z powyższą działalnością związana jest rozprawa habilitacyjna i tytuł osiągnięcia habilitacyjnego dr Chęcińska definiuje jako: „Charakterystyka wiązań chemicznych i oddziaływań niekowalencyjnych w oparciu o teoretyczny i/lub eksperymentalny rozkład gęstości elektronowej”.

5. Osiągnięcie habilitacyjne

Chciałbym teraz krótko odnieść się do prac wchodzących w skład osiągnięcia habilitacyjnego. Wśród publikacji przedstawionych jako podstawa osiągnięcia naukowego dr Chęcińskiej kilka prac wzbudziło moje zainteresowanie już dużo wcześniej, wtedy gdy te prace ukazywały się w druku. Wśród nich była publikacja H4: "Examination of intermolecular electronic interactions in the crystal structure of $C_{60}(CF_3)_{12}$ by experimental electron density determination" opublikowana w Chemical Communications (2007) 4003-4005 autorstwa Chęcińskiej, Troyanova, Mebs'a, Hübschle i Luger'a. Jest to analiza eksperymentalnego rozkładu gęstości elektronowej trifluorometylowej pochodnej fulereny, $C_{60}(CF_3)_{12}$. Był to - jak na badania gęstości elektronowej w tamtym okresie - duży i skomplikowany układ do wymodelowania eksperymentalnej gęstości elektronowej. Dodatkowo związek ten krystalizuje w trudnej grupie R-3, a sama molekula krystalizuje w pozycji szczególnej. Moim zdaniem samo wymodelowanie eksperymentalnej gęstości elektronowej jest sporym osiągnięciem i wymaga, po pierwsze, dużego kunsztu pomiarowego aby uzyskać eksperymentalne dane odpowiedniej jakości umożliwiającej modelowanie pochodnych fulerenów (które są znane ze słabej dyfrakcji promieni rentgenowskich - ale tu pomaga pomiar niskotemperaturowy w 20K); po drugie bardzo dużej biegłości w samym modelowaniu eksperymentalnej gęstości elektronowej ze względu na specjalną pozycję jaka zajmuje ta cząsteczka w sieci krystalicznej. Poza tym praca zawiera ciekawą analizę uzyskanych wyników. Można

powiedzieć, że atomy fluoru w tym układzie stanowią swego rodzaju elektronowe zaburzenie gęstości elektronowej i dr Chęcińska zbadała elektronowe skutki tego zaburzenia oraz naturę oddziaływań międzycząsteczkowych w tym układzie. Muszę przyznać że już w chwili publikacja praca ta przykuła moją uwagę i jest bardzo dobrym przykładem dużego kunsztu badawczego autorów w eksperymentalnych badaniach gęstości elektronowej kryształów molekularnych.

Bardzo wysoko cenię także prace dr Chęcińskiej o numerach od H6 do H8 związane z zastosowaniami udokładnienia metoda atomów Hirshfelda (HAR – Hirshfeld Atom Refinement) oraz z fitowaniem funkcji falowej do danych eksperymentalnych, Moim zdaniem te prace wnoszą istotne elementy nowości naukowej. Praca H6: CrystEngComm (2013). 15, 2084-2090 zatytułowana: „A comparison of electron density from Hirshfeld-atom refinement, X-ray wavefunction refinement and multipole refinement on three urea derivatives” zawiera porównanie kilku asferycznych modeli gęstości elektronowej trzech pochodnych mocznika (N-metylomocznika, N-fenylo mocznika i N,N'-difenylo mocznika) w oparciu o wysokorozdzielcze dane rentgenowskie: modelu multipolowego - traktowanego jako model referencyjny - oraz modelu wynikającego z udokładnienia HAR z symulacją pola krystalicznego (poprzez klaster ładunków i dipoli wokół udokładnianej cząsteczki), modelu HAR bez symulacji pola krystalicznego oraz modelu w reprezentacji bazowej XWR. Wszystkie modele gęstości w udokładnieniach HAR oraz XWR, zostały otrzymane przy pomocy programu Tonto38 z wykorzystaniem funkcjonału BLYP oraz baz Dunninga: cc-pVDZ oraz cc-pVTZ. Praca ta jest jedną z pierwszych prac walidujących HAR and XWR. Habilitantka uzyskała ciekawe wyniki wykazujące bardziej wiarygodne- czyli bardziej płaskie i pozbawione efektów systematycznych - rozkłady resztkowej gęstości elektronowej w przypadku nowych metod udokładnienia czyli HAR i XCW (ang. X-Ray Constrained Wavefunction Fitting). Przedyskutowała różnego rodzaju wskaźniki jakości udokładnienia w funkcji użytych baz wskazując, które z nich wydają się być najbardziej wiarygodne, wskazała na wzrost dokładności udokładnienia atomów wodoru gdy używa się procedury HAR, wskazała także na mniejsze odchylenia standardowe wyników udokładnienia struktur za pomocą HAR w porównaniu do rutynowych sposobów udokładnienia.

Praca H7 (Chęcińska, Mebs, Ośmiałowski, Zakrzewska, Ejsmont, Kohout, Tuning the electronic properties of the dative N-B bond with associated O-B interaction – the electron localizability indicator from X-ray wavefunction refinement, ChemPhysChem (2016). DOI: 10.1002/cphc.201600223) dotyczy charakterystyki wiązań chemicznych – głównie N-B oraz O-B) – za pomocą całego zestawu parametrów wynikających z teorii QTAM i parametrów Indeksu Lokalizowalności Elektronowej (ELI-D) uzyskanych z udokładnienia funkcji falowej. W pracy tej dwa związki boru [difluoroboranyl 2-benzoilometylenochinoliny oraz difluoroboranyl 2-(4-trifluorometylo)benzoilometylenochinoliny], dla których poprzednio zostały przedstawione struktury elektronowe w oparciu o udokładnienie funkcji falowej względem niskorozdzielczych danych dyfrakcyjnych, zostały użyte do porównania z trzecią pochodną [difluoroboranyl salicylideno- (4-izopropilo)aniliny], dla której również zaproponowano eksperymentalny model gęstości elektronowej uzyskany dzięki XWR. Habilitantka zbadała zarówno wyniki udokładnień gęstości elektronowej uzyskanej poprzez dopasowanie modelu do niskokątowych danych dyfrakcyjnych, wyniki obliczeniowe uzyskane dla izolowanych cząsteczek w fazie gazowej oraz wyniki badań uzyskane dla dziesięciu modelowych układów. Autorzy pracy - z wiodącą rolą dr Chęcińskiej – zbadali wpływ zmiennego otoczenia na wiązania N-B i O-B charakteryzując efekt podstawnikowy przy zamianie dwóch atomów fluoru na atom/atomy wodoru oraz zastosowali orbitale Fermiego do charakterystyki badanych oddziaływań. Autorzy pracy przedstawili cały szereg parametrów elektronowych, które mogą być użyte w różnego rodzaju użytecznych korelacjach. Dla mnie najciekawszym aspektem tej pracy jest uzyskanie sensownych parametrów rozkładu gęstości elektronowej nawet na podstawie udokładnienia niskorozdzielczych danych dyfrakcyjnych - oczywiście wtedy, gdy stosowany jest HAR i XCW. To oznacza możliwość poprawienia jakości wyników rutynowych udokładnień danych dyfrakcyjnych uzyskanych przy użyciu IAM czy też modelu multipolowego.

Praca H8 [Kasprzak, Fabijańska, Chęcińska, Szmigiero, Ochocki, „New look on 3-hydroxyiminoflavanone and its palladium(II) complex: crystallographic and spectroscopic studies, theoretical calculations and cytotoxic activity”, Molecules (2016). 21, 455] dotyczy charakterystyka

wiązań chemicznych i struktury elektronowej syntetycznych pochodnych flawanonu. W pracy tej przebadany został ligand - pochodna flawanonu- oraz kompleks palladu(II) z tym ligandem. Ponownie dr Chęcińska udokładniła funkcję falową na podstawie niskokątowych danych dyfrakcyjnych i wykazała, że uzyskuje sensowne wyniki pozwalające na szczegółową charakterystykę wiązań chemicznych i słabych oddziaływań. W porównaniu do poprzedniej pracy poprzeczka została postawiona wyżej ponieważ w tej pracy rozważany był kompleks z metalem ciężkim co zawsze utrudnia badania zarówno eksperymentalne jak i teoretyczne.

Także pozostałe prace dr Chęcińskiej z serii habilitacyjnej są interesujące chociaż mi osobiście wydają się nieco bardziej rutynowe niż prace wspomniane przeze mnie powyżej. Praca H1 [Chęcińska, Grabowski, "F-H...F-C hydrogen bonds -The influence of hybridization of carbon atom connected with F-acceptor on their properties", *Chemical Physics* (2006). 327, 202-208] pierwsza i jedyna w serii habilitacyjnej wykonana we współpracy z Prof. Sławomirem Grabowskim gdy był jeszcze w Łodzi, jest ciekawą pracą ale bardziej związana z zainteresowaniami naukowymi Prof. Grabowskiego. W badaniach obliczeniowych Habilitantka zastosowała Kwantową Teorię Atomów w Cząsteczkach w celu scharakteryzowania wiązań i oddziaływań związanych z wiązaniem wodorowym F-H...F-C. Główną zaletą tej pracy jest wybór ciekawego przedmiotu badań, staranne obliczenia na kilku poziomach teorii i szczegółowa interpretacja wyników.

W publikacji H2 [Chęcińska, Mebs, Hübschle, Förster, Morgenroth, Luger, „Reproducibility and transferability of topological data: experimental charge density study of two modifications of L-alanyl-L-tyrosyl-L-alanine”, *Organic & Biomolecular Chemistry* (2006). 4, 3242-3251], poruszony jest problem odtwarzalności i przenaszalności właściwości atomowych i wiązań w badaniach eksperymentalnej gęstości elektronowej tripeptydu L-Ala-L-Tyr-L-Ala. W pracy tej zbadano eksperymentalne i teoretyczne gęstości elektronowe dwóch modyfikacji tripeptydu L-Ala-L-Tyr-L-Ala: w formie hydratu [$C_{15}H_{21}N_3O_5 \cdot 2,634H_2O$] oraz w formie solwatu z etanolem [$C_{15}H_{21}N_3O_5 \cdot xC_2H_5OH$]. Celem pracy było określenie zakresów odtwarzalności i przenaszalności zarówno parametrów topologicznych wiązań chemicznych, jak i zintegrowanych właściwości atomowych. I chociaż takie podobne badania były już publikowane to godny podkreślenia jest wybór przedmiotu badań. Mianowicie badania krótkich modelowych polipeptydów mogą być wstępem do badań znacznie większych i ważniejszych makromolekuł czyli białek. Dr Chęcińska określiła swego rodzaju numeryczne granice odtwarzalności i przenaszalności parametrów elektronowych wynikających z teorii QTAM w tych układach.

Praca H3 [Jaradat, Mebs, Chęcińska, Luger, „Experimental charge density of sucrose at 20 K: Bond topological, atomic and intermolecular quantitative properties”, *Carbohydrate Research* (2007). 342, 1480-1489] dotyczy charakterystyki eksperymentalnej i obliczonej metodami chemii kwantowej gęstości elektronowej, a szczególnie wiązań kowalencyjnych i oddziaływań niekowalencyjnych, w kryształach sacharozy. Podobnie jak w innych pracach autorzy użyli teorii QTAIM w celu scharakteryzowania szczegółów rozkładu gęstości elektronowej w tym ciekawym związku. Między innymi dla wiązań wodorowych typu O-H...O występujących w kryształach sacharozy zostały znalezione zależności gęstości elektronowej, laplasjanu oraz parametru λ_3 w funkcji odległości H...O. Jednakże szkoda, że takie zależności już wcześniej opublikowane dla innych układów nie zostały zacytowane w tej pracy.

Praca H5 [Chęcińska, Grabowsky, Małecka, Rybarczyk-Pirek, Józwiak, Paulmann, Luger, „Experimental and theoretical electron density study of three isoindole derivatives: topological and Hirshfeld surface analysis of weak intermolecular interactions”, *Acta Crystallographica* (2011). B67, 569-581] zawiera analizę słabych oddziaływań międzycząsteczkowych w oparciu o eksperymentalny i teoretyczny rozkład gęstości elektronowej trzech pochodnych izoindolu. Głównym celem tej pracy była analiza słabych oddziaływań międzycząsteczkowych, począwszy od wiązań typu C-H...O, poprzez te z udziałem elektronów π , a skończywszy na kontaktach typu H...H. Ta praca podobnie jak i dwie poprzednie zawiera analizę parametrów punktowych i zintegrowanych i jest dosyć rutynowa nie mniej zawiera ciekawe wyniki dotyczące oddziaływań H...H w sieci krystalicznej.

Seria publikacji tworzących habilitację uzupełniona jest długą listą publikacji (27 publikacji i 7-miu raportów strukturalnych, w tym 24 publikacji po uzyskaniu stopnia doktora) nie wchodzących do serii habilitacyjnej. Dominują prace strukturalne dotyczące kompleksów jonów

metali ciężkich takich jak platyna, pallad, ruten i srebro oraz kilka badań gęstości elektronowej. Kilka z tych prac opublikowanych jest w całkiem niezłych czasopismach naukowych.

6. Uwagi krytyczne

Chciałbym teraz przedstawić uwagi krytyczne na temat przesłanych mi do oceny materiałów związanych z habilitacją dr Chęcińskiej. Moim zdaniem określenie osiągnięcia habilitacyjnego przez dr Chęcińską jako „Charakterystyka wiązań chemicznych i oddziaływań niekowalencyjnych w oparciu o teoretyczny i/lub eksperymentalny rozkład gęstości elektronowej” nie jest, moim zdaniem, najszcześniejsze, ponieważ parametry których używa dr Chęcińska do oceny oddziaływań były wcześniej wprowadzone przez Richarda Badera i jego uczniów. W tym kontekście osiągnięciem dr Chęcińskiej jest zastosowanie wcześniej wprowadzonych parametrów wynikających z teorii AIM w serii ciekawych kryształów. Ale moim zdaniem, w przesłanej mi serii publikacji jest znacznie ważniejszy element nowości. Moim zdaniem główną zaletą dorobku dr Chęcińskiej jest wyjście poza zastosowania IAM oraz udokładnienia multipolowego. Mam tu na myśli publikacje związane z HAR i XCW. Habilitantka jest świadoma wagi tych wyników o czym wspomina w swoim podsumowaniu serii publikacji H1-H8. Nie mniej główny akcent dr Chęcińska kładzie na analizę oddziaływań pewnie chcąc zaproponować nieco szerszą podstawę dla serii publikacji definiujących osiągnięcie habilitacyjne.

Drugi nieco denerwujący aspekt prac przesłanych mi do oceny to zauważalne braki w cytowaniach publikacji związanych z tematyką uprawianą przez dr Chęcińską. W niektórych pracach stwarza to niedobre wrażenie jakoby zależności między parametrami opisującymi rozkłady gęstości elektronowej oraz parametrami strukturalnymi były wcześniej nieznane, a nie jest to prawdą i dr Chęcińska powinna szerzej wykonywać przeszukania literaturowe pracując nad swoimi publikacjami, a uzyskane informacje na temat publikacji poprzedzających jej prace powinna umieszczać w swoich publikacjach oraz w przesłanym opracowaniu. Tym bardziej że dziedzina nauki którą uprawia dr Chęcińska nie jest bardzo rozległa.

Szkoda, że w Polsce odchodzi się od przygotowywania przez habilitantów rozprawy habilitacyjnej w formie szerszej pracy omawiającej osiągnięcia danego habilitanta na tle stanu danego pola na świecie. W tym kontekście, o ile jestem usatysfakcjonowany przedstawieniem przez Habilitantkę swojego osiągnięcia w serii swoich publikacji, o tyle brakuje mi tego bardziej szczegółowego tła międzynarodowego badań wykonywanych przez dr Chęcińską.

Chciałbym także zwrócić uwagę na występujące braki w kompletności zmierzonych danych wysokorozdzielczych – brakuje mi w tych pracach swego rodzaju dyskusji konsekwencji niepełnej kompletności danych w udokładnieniu różnych modeli gęstości elektronowej.

7. Konkluzja

Generalnie mimo pewnych uwag krytycznych przedstawionych powyżej, nie mam wątpliwości, że dr Lilianna Chęcińska ma swoje określone pole badawcze na styku nowoczesnej krystalografii i aplikacyjnej chemii obliczeniowej i przedstawiła w swoich publikacjach oryginalne wyniki. Osobiście najwyżej cenię publikację dotyczącą multipolowego udokładnienia gęstości elektronowej w kryształach pochodnej C_{60} oraz prace związane z walidacją HARu i XCW. Pierwsza z tych prac (o pochodnej C_{60}) jest świadectwem wysokiego kunsztu dr Chęcińskiej w udokładnieniu multipolowym eksperymentalnych wysokorozdzielczych danych dyfrakcyjnych (potwierzonego licznymi udokładnieniami modelu multipolowego gęstości elektronowej w innych publikacjach), natomiast seria kilku prac związanych z walidacją HARu i XCW jest świadectwem dojrzałości Habilitantki, która bezbłędnie zidentyfikowała pojawiające się nowe, ciekawe i bardzo ważne pole badawcze i potrafiła włączyć się we „frontowe badania krystalograficzne” mimo braku bazy eksperymentalnej na Uniwersytecie Łódzkim. Dr Chęcińska potrafiła pokonać braki aparaturowe poprzez dobrze przemyślaną współpracę międzynarodową z takimi potęgami krystalograficznymi jak Peter Luger (na którego książce wychowało się całe pokolenie krystalografów w Polsce i w Europie) czy Dylan Jayatilaka (twórca HARu i XCW) oraz ze świetnymi krystalografami młodszego pokolenia takimi jak Birger Dittrich czy Simon Grabowsky.

Na szczególne podkreślenie zasługują prace dr Chęcińskiej poświęcone HAR i XCW. Proces walidacji/weryfikacji tych nowych metod udokładnienia jest bardzo złożony i wymagający

niezwykle dużo pracy i dużo obliczeń. Ta walidacja w dalszym ciągu trwa i jeszcze będzie trwała kolejne długie lata. Powiedziałbym, że obecnie około 10-ciu może 15-tu osób na świecie używa HARu oraz XCW w swoich badaniach wykonując głównie prace walidacyjne. A jednocześnie z prac już opublikowanych i tych obecnie publikowanych widać, że HAR i XCW zmieniają paradygmat w współczesnej krystalografii dotyczący udokładnienia/modelowania danych eksperymentalnych. Pani dr Lilianna Chęcińska tymi kilkoma pracami H6-H8 – a szczególnie pracą H6 opublikowaną w 2013-tym roku - ma w tej weryfikacji użyteczności HARu oraz XCW swoje zauważalne miejsce. Moim zdaniem dr Chęcińska bardzo dobrze zidentyfikowała nowe, właśnie pojawiające się, trendy w nowoczesnej krystalografii i swoimi pracami włączyła się w te nowoczesne badania. Dla mnie jako recenzenta te właśnie prace są największym osiągnięciem dorobku dr Chęcińskiej i to dzięki nim zasługuje na habilitację.

Po zapoznaniu się z pracami dr Chęcińskiej, oraz z przesłanymi mi Materiałami, popieram wniosek o nadanie stopnia dr habilitowanego dr Liliannie Chęcińskiej. Moim zdaniem dorobek naukowy dr Chęcińskiej spełnia wymagania ustawowe (Ustawa z dnia 14 marca 2003 O stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki; Dz. U. z 2003 r., nr 65, poz. 595 oraz Rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 1 września 2011 w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego - Dz.U. nr 196, poz.1165) na stopień doktora habilitowanego, a szczególnie prace na temat HAR i XCW charakteryzuje się oryginalnością i dużą nowością. Dorobek ten przyczynił się do postępu na tym nowym wyłaniającym się polu badawczym.

Dlatego niniejszym wnoszę do Wysokiej Komisji, a przez Komisję do Rady Wydziału Chemii UŁ, o nadanie dr Liliannie Chęcińskiej stopnia doktora habilitowanego.



Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak