

Prof. dr hab. Maciej Kubicki  
Zakład Krystalografii  
Wydział Chemii  
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Poznań, 16 października 2016

**Recenzja rozprawy habilitacyjnej (osiągnięcia naukowego) „Charakterystyka wiązań chemicznych i oddziaływań niekowalencyjnych w oparciu o teoretyczny i/lub eksperymentalny rozkład gęstości elektronowej” oraz całości dorobku zawodowego dr Lilianny Chęcińskiej**

W związku z rozpoczętą na Wydziale Chemii Uniwersytetu Łódzkiego procedurą habilitacyjną dr Lilianny Chęcińskiej, adiunkta na Wydziale Chemii UŁ, i z powołaniem mnie w skład komisji habilitacyjnej w tym postępowaniu (powołanie komisji nastąpiło 6 września 2016), otrzymałem do recenzji zestaw dokumentów obejmujący m.in. autoreferat, kopie publikacji stanowiących oceniane osiągnięcie naukowe wraz z oświadczeniami współautorów dotyczącymi ich udziału w tych publikacjach, a także wykaz opublikowanych prac naukowych z ich analizą scjentometryczną oraz informacje o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki.

Pani dr Lilianna Chęcińska uzyskała tytuł zawodowy magistra chemii w 1999 roku na Wydziale Fizyki i Chemii Uniwersytetu Łódzkiego. W roku 2003, na tym samym Wydziale, obroniła wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. Inż. Marii Bukowskiej-Strzyżewskiej rozprawę doktorską zatytułowaną „Struktura cząsteczek i kryształów nowych pochodnych *N,N'*-podstawionego fosfonylowanego tiomocznika”. Od 2003 roku jest zatrudniona na stanowisku adiunkta w Katedrze Chemii Teoretycznej i Strukturalnej na Wydziale Chemii UŁ.

### **Ocena aktywności naukowej**

Dorobek naukowy Habilitantki obejmuje 42 publikacje, z czego 7 zostało opublikowanych przed, a 35 po doktoracie (tak się w każdym razie domyślam po przeprowadzeniu sumowania IF). Spośród nich 7 (3 po doktoracie) to publikacje w *Acta*

*Crystallographica part E*, które to czasopismo w międzyczasie wypadło z JCR. Sumaryczny czynnik wpływu tych publikacji wynosi 88,925, według *Web of Science* były one cytowane 348 razy (319 bez autocytowań), a indeks Hirscha Habilitantki wynosi 11. Prace Habilitantki były publikowane w czasopismach o zróżnicowanych czynnikach wpływu, od  $IF < 1$  (np. *Journal of Chemical Crystallography*, *Acta Crystallographica part C*), poprzez *Structural Chemistry* czy *Polyhedron* ( $IF$  ok. 2), aż po prace (z ostatnich lat) w *Chemical Communications* ( $IF$  6,834), czy *Crystal Growth and Design* (4,891). Można zauważyć godną pochwały tendencję do publikowania w czasopismach o coraz wyższym czynniku wpływu.

Pani dr Chęcińska odbyła kilka staży zagranicznych, związanych bezpośrednio z tematyką Jej badań, w ośrodkach istotnych dla badań rozkładu gęstości elektronowej – w grupach P. Lugera, J. Beckmanna i B. Dittricha.

*Analiza dorobku naukowego p. dr Lilianny Chęcińskiej wyraźnie pokazuje, że po doktoracie i jednym dobrze ulokowanym, ośmiomiesięcznym stażu podoktorskim, znalazła własną ścieżkę rozwoju naukowego. Potrafiła – pomimo trudności z pracami doświadczalnymi, spowodowanych brakiem ‘własnego’ dyfraktometru - włączyć się w najnowsze badania dotyczące rozwoju metodologii doświadczalnego określania gęstości elektronowej w kryształach, a także połączyć je z wiedzą i umiejętnościami z zakresu chemii obliczeniowej.*

Habilitantka wygłosiła 2 referaty na konferencjach naukowych, w tym na 6th European Charge Density Meeting w Strbskim Plesie). W dorobku ma też 44 komunikaty posterowe, na konferencjach krajowych i międzynarodowych, a także prezentacje swoich wyników na seminariach naukowych w Berlinie, Getyndze, Poznaniu, Łodzi i Bremie (nawiasem pisząc, nie wiem dlaczego te seminaria znalazły się w punkcie III.I załącznika 3, zatytułowanym „Osiągnięcia dydaktyczne i w zakresie popularyzacji nauki...”). Kilka razy recenzowała publikacje nadesłane do renomowanych czasopism o międzynarodowym zasięgu (*CrystEngComm*, *Cryst.Growth Des.*).

Była wykonawcą w dwóch grantach KBN/NCN, a także kierowała grantami pomiarowymi w ośrodku synchrotronowym Hasylab/DESY latach 2007-2012 oraz grantem obliczeniowym ACK Cyfronet.

Za osiągnięcia naukowe Habilitantka została wyróżniona nagrodami zespołowymi Ministra Zdrowia, Rektora UŁ (trzykrotnie) oraz Rektora Uniwersytetu Medycznego w Łodzi (też trzykrotnie).

*Aktywność naukowa dr Lilianny Chęcińskiej, w tym przede wszystkim dorobek po doktoracie, spełnia wymagania stawiane habilitantom.*

## Osiągnięcie naukowe

Przedmiotem habilitacji (potencjalnym osiągnięciem naukowym) jest cykl ośmiu artykułów, których współautorką jest p. dr Chęcińska. Publikacje te ukazały się w latach 2006 – 2016, w czasopismach o sumarycznym czynniku wpływu 26,030 (co daje całkiem przyzwoitą średnią 3,25 na publikację), i jak dotąd były cytowane 89 razy według Web of Science. W siedmiu z tych artykułów Habilitantka jest autorką pierwszą, a w trzech – korespondencyjną. Kilkunastostronicowy, niezłe napisany – aczkolwiek miejscami zgrzytający stylistycznie w moich uszach - komentarz (autoreferat) uzupełnia wspomniany cykl prac.

Publikacjom towarzyszą oświadczenia współautorów; są one w pełni zgodne ze wskazanym przez Habilitantkę Jej autorskim wkładem. Na marginesie dodam, że lektura oświadczeń jest pouczająca. Można się z nich na przykład dowiedzieć – czym p. Chęcińska w swojej skromności się nie pochwaliła – że to Ona jako pierwsza wykonała pomiar dyfrakcyjny używając nowej instalacji helowej w hamburskim synchrotronie, a także, znalazła i poprawiła błędy w programach komputerowych. Albo, że jeden ze współautorów opisuje swój udział w publikacji jako pomoc w przygotowaniu dwóch rysunków...

Udział p. dr Chęcińskiej jest w zdecydowanej większości (siedmiu) pracach dominujący, od 65% do 80%. Wyjątkiem jest najnowsza praca H8, w której wkład ten szacuje dr Chęcińska (w zgodzie z oświadczeniami innych autorów) na 20%. W opinii recenzenta brak prac, w których jedynym autorem byłaby dr Chęcińska nie jest w żadnej mierze argumentem przeciw docenieniu zgłoszonego zbioru prac jako Jej osiągnięcia naukowego. Współczesna chemia, zwłaszcza - chociaż na pewno nie wyłącznie - doświadczalna, jest domeną (często dużych) zespołów badawczych. Fakt umiejętności dobrania zespołu (lub znalezienia się w takim) jest sam w sobie argumentem na rzecz dojrzałości naukowej.

Cel naukowy, który próbowała zrealizować Habilitantka, ona sama opisuje dość szeroko aczkolwiek precyzyjnie, jako „interpretacja charakteru wiązań chemicznych i zgłębienie natury oddziaływań niekonwalencyjnych”. Należy więc spojrzeć na prezentowany zbiór prac pod kątem realizacji tego celu (na pewno trzeba go uszczegółowić), oraz znaleźć indywidualny wkład p. dr Chęcińskiej w każdej z prac.

Zacznę może od stwierdzenia, że trochę rozczarował mnie autoreferat, w którym można był się spodziewać wskazówek do rozwiązania powyżej opisanego zadania, a który w gruncie rzeczy jest streszczeniem ośmiu publikacji z autobiograficznym wstępem i lakonicznym podsumowaniem. Idea łączące te prace (czyli, jak rozumiem, wspomniany wyżej cel naukowy) jest, owszem, widoczna, ale czytelnik jest zmuszony samodzielnie wyszukiwać związki między kolejnymi pracami. Pewną przesłanką uzasadniającą ewentualne

kłopoty w znalezieniu takiego związku jest dziwny i rzadko spotykany fakt, że prace z cyklu habilitacyjnego były cytowane niemal 100 razy... bez jednego choćby autocytowania!

Doświadczalne badania rozkładu gęstości elektronowej w kryształach (na podstawie wysokorozdzielczych danych dyfrakcyjnych) stały się dojrzałą dziedziną nauki, a rozwój technologiczny pozwala na powszechniejsze ich stosowanie. Niemniej wciąż są to badania wymagające, niestandardowe i dość kłopotliwe, ale za to umożliwiające wgląd na przykład w naturę wiązań chemicznych i słabych oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych. W ten właśnie nurt badań włączyła się p. dr Chęcińska. Na przykładzie cyklu prac przez Nią zaprezentowanych doskonale widać rozwój metody, a także wyzwania przed nią stojące i pewien ferment, jaki można zaobserwować w ostatnich kilku latach. Chwała Habilitantce, że bierze udział w tym procesie, który może (choć oczywiście nie musi) zaowocować dość znacznymi zmianami także w zakresie standardowych badań metodami rentgenowskiej analizy strukturalnej.

Nie mam zamiaru ponownie recenzować opublikowanych (rezygnując z suspensu mogę tu dodać: i bardzo dobrych) prac. Skupię się na prześledzeniu ich związku – w zakresie, za który odpowiedzialna była Habilitantka – z deklarowanym celem badań, a także spróbuję uzasadnić, że to *osiągnięcie naukowe* stanowi wspomniany w ustawie *znaczny wkład w rozwój dyscypliny naukowej*.

Cykl zaczyna czysto obliczeniowa praca **H1** (wykonana jeszcze w Łodzi), w której Autorka na przykładzie dobrze określonego zbioru kompleksów molekularnych badała naturę słabego wiązania wodorowego F-H...F-C. Użyła do tego kilku metod i poziomów obliczeń kwantowomechanicznych, a do charakterystyki oddziaływań wykorzystała pojęcia i metody teorii *atomów w cząsteczkach (Atoms-in-Molecules)*. Wyniki pozwoliły charakteryzować naturę oddziaływań, a także określić wpływ dodatkowych czynników (hybrydyzacja atomu węgla, podstawniki) na ich parametry energetyczne. Następne prace są efektem/konsekwencją stażu podoktorskiego w zespole Petera Lugera w Berlinie i nawiązanych tam kontaktów naukowych. Następuje też rozszerzenie zasobu stosowanych narzędzi – Autorka wykonuje wysokorozdzielcze pomiary dyfrakcyjne (synchrotronowe) i łączy wyniki eksperymentalne z obliczeniami. W pracy **H2** dr Chęcińska opisuje wyniki badań rozkładu gęstości elektronowej w trójpeptydzie L-Ala-L-Tyr-L-Ala i pokazuje, że topologiczne właściwości wiązań chemicznych dają się przenosić pomiędzy podobnymi układami. Analizuje też źródła ewentualnych niezgodności między wynikami doświadczeń i obliczeń kwantowomechanicznych dla wiązań polarnych. Była to część szerszego projektu zespołu Lugera, ale wkład Habilitantki jest dobrze udokumentowany i niewątpliwie wnosi nową wiedzę dotyczącą natury wiązania chemicznego i możliwości jego badania. Praca **H3** to badania sacharozy – tutaj oprócz informacji dotyczących chemicznie ważnych wiązań (w tym wpływu anomerycznego atomu węgla) w cukrach ważne są też słabsze oddziaływania

wewnątrz- i międzycząsteczkowe. Analiza takich oddziaływań pojawia się też w kolejnym artykule serii, opisującym wyniki dla pochodnej fullereny C<sub>60</sub>.

Kolejne prace dokumentują włączenie się p. dr Chęcińskiej we wspomniany wyżej ferment metodologiczny. Wykorzystując swoje kompetencje doświadczalne i obliczeniowe bierze udział w tworzeniu i testowaniu nowatorskich metod udokładniania modeli cząsteczek wychodzących poza model niezależnych atomów, a różnych od niemal wyłącznie używanego modelu multipolowego, w szczególności w sformułowaniu Hansena-Coppensa. Począwszy od pracy H5 pojawia się *udokładnianie metodą atomów Hirshfelda (Hirshfeld Atom Refinement, HAR)*. W pracy tej, stosując dodatkowo popularną od jakiegoś czasu metodę opisu oddziaływań za pomocą powierzchni Hirshfelda, opisano rozkład gęstości elektronowej i własności topologiczne słabych oddziaływań w rodzaju wiązań C-H...O, C-H...π i π...π, a także podjęto interesujący i ważny temat natury oddziaływań pomiędzy atomami wodoru, H...H. Szczególnie ciekawa i charakterystyczna jest praca H6, w której Autorka (w doborowym zespole pionierów opisywanych metod) porównuje wyniki uzyskane w wyniku kilku różnych metod udokładniania niesferycznego: tradycyjną metodą multipolową, metodą HAR i *udokładnianiem funkcji falowej z więzami określonymi eksperymentalnymi danymi dyfrakcyjnymi (X-ray wavefunction refinement, XWR)*. Wyniki pokazują zalety metod alternatywnych – wydaje się, że może to być droga pozwalająca na pokonanie coraz wyraźniej widocznych ograniczeń modelu multipolowego. Kolejne dwie prace włączają kolejne narzędzia: wskaźnik (*indeks*) *lokalizowalności elektronowej (electron localizability indicator)* w pracy H7, opisującej wyniki dla bardzo ciekawych, a nietrywialnych wiązań typu N-B czy O-B, a także wykorzystanie metod HAR do niestandardowego udokładniania standardowych danych dyfrakcyjnych (H8).

Pomimo różnorodności obiektów badań bez trudu można znaleźć przewodnią myśl całego cyklu – którą jest deklarowany cel naukowy - i indywidualny wkład Habilitantki. Wyraźnie widać, że p. dr Chęcińska jest na bardzo dynamicznym etapie rozwoju naukowego i poszukuje nowych wyzwań, nie poprzestając na co prawda dobrze działających, ale niedoskonałych metodach. W zasadzie jest to już samodzielny naukowiec, we wszystkich publikacjach widać ślad Jej zainteresowań.

*Zestaw ośmiu prac jest różnorodny, co może świadczyć o szerokości zainteresowań naukowych Habilitantki. Są to prace wieloautorskie, ale (poza jednym wyjątkiem H8) z dominującym udziałem p. dr Chęcińskiej, opublikowane w wystarczająco zacnych czasopiśmie (zarówno pod względem IF jak i renomy w środowisku). P. Chęcińska jest autorem pierwszym i korespondencyjnym, a jak wynika z oświadczeń – również tym autorem, który decydował o zakresie, układzie i charakterze pracy.*

*Cykl prac, przedstawiony przez p. dr Liliannę Chęcińską jako osiągnięcie naukowe w procedurze habilitacyjnej spełnia, moim zdaniem, wszystkie wymogi – zarówno formalne, jak i zwyczajowe – stawiane w tego rodzaju postępowaniach. Są to bardzo interesujące publikacje, które znajdują oddźwięk w literaturze naukowej i wnoszą istotny wkład w poznanie i wyjaśnienie natury wiązania chemicznego i oddziaływań niekowalencyjnych. Dodatkowo warto podkreślić ich znaczenie metodologiczne w okresie dość burzliwego rozwoju dyscypliny.*

### **Charakterystyka dorobku dydaktycznego i organizacyjnego**

Pani dr Chęcińska była jak do tej pory w rozmaity – typowy dla tego etapu kariery naukowej - sposób zaangażowana w dydaktykę na macierzystej uczelni. Prowadziła różne zajęcia ze studentami: wykład kursowy *Elementy* krystalografii, wykład monograficzny, wykłady specjalnościowe, zajęcia konwersatoryjne i laboratoryjne (*Elementy* krystalografii, *Krystalografia*, *Chemia strukturalna*, *Podstawy chemii teoretycznej* itd.) oraz seminarium dyplomowe.

Była kierownikiem 6 prac licencjackich i opiekunem naukowym 8 prac magisterskich, promotorem i opiekunem jednej pracy magisterskiej (2010), opiekunem naukowym studenta w Berlinie (podczas stażu podoktorskiego). Recenzowała 12 prac licencjackich i 3 prace magisterskie.

Działalność organizacyjna Habilitantki nie została ujęta w przesłanych mi dokumentach.

*Zaangażowanie w dydaktykę p. dr Lilianny Chęcińskiej oceniam jako co najmniej wystarczające.*

## Konkluzja

Wysoko oceniam aktywność naukową dr Lilianny Chęcińskiej oraz inne aspekty jej działalności. Cykl prac, stanowiący zgłoszone osiągnięcie naukowe wskazuje na samodzielność Habilitantki oraz na zbudowanie przez nią warsztatu do realizacji naukowo istotnych badań.

Stwierdzam, że przedstawione mi do oceny materiały dotyczące dr Lilianny Chęcińskiej stanowią wystarczającą podstawę do ubiegania się przez nią o stopień doktora habilitowanego. Moim zdaniem, wypełniają one zarówno wymogi Ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595 z późn. zm.), jak i Rozporządzenia 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).

7

Maaj Kea