

Wrocław, dnia 9 marca 2015 r.

Prof. dr hab. Leszek Z. Ciunik
Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego
ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
Tel. 71 375 7239,
e-mail: leszek.ciunik@chem.uni.wroc.pl

**Ocena dorobku naukowego rozprawy habilitacyjnej pt.
*Strukturalne i elektronowe aspekty oddziaływań wewnątrz-
i międzycząsteczkowych w związkach organicznych o
potencjalnych właściwościach biologicznych* dr Magdaleny
Małeckiej z Wydziału Chemii Uniwersytetu Łódzkiego**

Ocena formalna

W związku z otwartym na Wydziale Chemii Uniwersytetu Łódzkiego przewodem habilitacyjnym dr Magdaleny Małeckiej, zatrudnionej na etacie adiunkta tegoż Wydziału, otrzymałem do recenzji zestaw dokumentów obejmujący: kopię dyplomu doktorskiego, przebieg wykształcenia wyższego i pracy zawodowej, dorobek naukowy w zakresie rozprawy habilitacyjnej w tym kopie dwunastu artykułów naukowych, listę pozostałych publikacji, omówienie osiągnięcia naukowego, wykaz osiągnięć naukowo-badawczych nie objętych rozprawą habilitacyjną, udział w realizacji programów badawczych, informacje o odbytych stażach i szkoleniach, o działalności dydaktycznej, współpracy naukowej oraz spis wystąpień na konferencjach i innych. Wymienione dokumenty złożono w dwu wersjach językowych, polskiej i angielskiej.

Ogólny dorobek naukowy pani dr M. Małeckiej obejmuje 57 publikacji, w tym 43 artykuły naukowe w czasopismach z listy filadelfijskiej i 13 raportów strukturalnych. Sumaryczny współczynnik wpływu ok. 72,9 dla artykułów przed (2) i po doktoracie (41), średnio 1,7 na pracę, dość dobrze odzwierciedla dorobek Autorki. W dorobku habilitacyjnym na który składa się cykl 12. prac, wyróżniają się dwa czasopisma o wyższym współczynniku wpływu: *Journal of Physical Chemistry A* (if = 2,856) i *CrystEngComm* (if = 3,908). W pierwszym przypadku dominującym autorem (korespondencyjnym) był prof. Sławomir Grabowski a w drugim Habilitantka. Oceniając udział dr M. Małeckiej w powstawaniu artykułów naukowych, w 4. na 12 publikacji (tj. w okresie lat 2001–2006) autorami korespondencyjnymi byli inni współautorzy co oznacza, że tematyka habilitacji dość wolno krystalizowała. Inne parametry bibliometryczne charakteryzujące całkowity dorobek dr M. Małeckiej to indeks Hirscha 12 i 331 cytowań przez innych autorów.

W 2013 r. na wniosek Habilitantki nastąpiło umorzenie wszczętego rok wcześniej przewodu habilitacyjnego w celu uzupełnienia złożonego wówczas wniosku habilitacyjnego zgodnie z sugestią jednego z recenzentów. Analizując przedstawiony do oceny Autoreferat należy stwierdzić, że Autorka opublikowała dwa kolejne artykuły, w których była głównym autorem tzw. korespondencyjnym. Jedna z nich to wymieniona wcześniej praca opublikowana w *CrystEngComm*.

Pani dr M. Małecka jest doświadczonym nauczycielem akademickim o około 28-letnim stażu zawodowym na Wydziale Chemii UŁ. W tym okresie była zatrudniona na stanowisku specjalisty a po doktoracie (1999 r.) jako adiunkt w Katedrze Krystalografii i Krystalochemii (obecnie w Katedrze Chemii Teoretycznej i Strukturalnej).

W latach 2004 – 2012 dr M. Małecka uczestniczyła w pięciu grantach. W trzech wypadkach celem grantów były pomiary synchrotronowe w Hamburgu, po jednym razie była kierownikiem grantu badawczego Uniwersytetu Łódzkiego oraz wykonawcą grantu KBN.

Pani dr M. Małecka nie odbywała długoterminowych staży zagranicznych. Najdłuższe pobyty naukowe odbyła w Niemczech w ramach dwumiesięcznych grantów badawczych DAAD (dwa razy) oraz czteromiesięcznego grantu DFG. We wszystkich przypadkach przebywała w laboratoriach krystalograficznych.

Podobnie jak większość krystalografów na świecie, Habilitantka ma długą listę laboratoriów, z którymi współpracuje. Najdłuższa i najbardziej owocna współpraca trwa już 15 lat z prof. Elżbietą Budzisz. W ramach tej współpracy ukazały się artykuły m.in. w *Inorganic Chemistry* i *Crystal Growth & Design*.

Od początku zatrudnienia na Wydziale Chemii pani Doktor prowadziła zajęcia dydaktyczne obejmujące różne formy nauczania Krystalografii. Początkowo były to tylko zajęcia laboratoryjno-konwersatoryjne ale po obronie doktoratu – wykłady.

Za swoją pracę dr M. Małecka była kilkakrotnie nagradzana przez Rektora Uniwersytetu Łódzkiego a w 2011 r. otrzymała Złotą Odznakę Uniwersytetu.

Ocena badań naukowych

Przedstawiony do oceny cykl 12. publikacji obejmuje badania oddziaływań międzycząsteczkowych „w grupie związków o potencjalnych właściwościach biologicznych” – pochodnych chromonu i oksafosfinianu. Ich wspólną cechą strukturalną jest występowanie w kryształach wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego wspomagane rezonansem i słabymi oddziaływaniami międzycząsteczkowymi. Pani Doktor wykonywała badania krystalograficzne oraz obliczenia kwantowo-chemiczne. Wszystkie związki syntezowane były przez współautorów publikacji.

Załączone do rozprawy publikacje reprezentują szerokie spektrum stosowanych metod. Od prostych eksperymentów krystalograficznych po wyrafinowane metody pomiarów wysokorozdzielczych, od obliczeń eksperymentalnych map gęstości elektronowej do obliczeń map teoretycznych. Dyskusję zazwyczaj zamykała analiza topologiczna rozkładu gęstości elektronowej bazująca na metodach opisanych przez Badera. Do najciekawszych artykułów zaliczyłbym pracę H11 opublikowaną w *Acta Crystallographica B*, zakończoną interesującymi wnioskami o naturze chemicznej wiązań P – O w zbadanej fosfinie oraz H12 opublikowaną w *CrystEngComm* w której przedstawiono wyniki badań trzech pochodnych kumaryny w tym analizę wpływu oddziaływań C...H z powierzchni Hirshfelda na lipofilowość cząsteczek czyli parametr mający istotne znaczenie dla aktywności biologicznej związków. Tego typu wniosków brakowało mi przy czytaniu wcześniejszych publikacji Habilitantki.

Dominowały w nich „warsztatowe” problemy analizy topologicznej funkcji gęstości elektronowej, nie „przełożone” na język chemiczny. Wydaje mi się, że w ten sposób stracono okazję połączenia informacji o wiązaniach wodorowych wspomaganych rezonansem z właściwościami chemicznymi i biologicznymi badanych związków. Jeżeli prześledzić zgłoszone publikacje w kolejności chronologicznej, to jak na dłoni widać etapy rozwoju naukowego Habilitantki. Jak wcześniej napisałem, w czterech artykułach opublikowanych do 2006 r. głównymi autorami byli profesorowie Elżbieta Budzisz z Wydziału Farmacji UM w Łodzi lub Sławomir Grabowski z Wydziału Chemii UŁ. O ile zainteresowania naukowe pani prof. Budzisz i dr Małeckiej wzajemnie się uzupełniały to czytając publikacje napisane we współpracy z prof. Grabowskim odnoszę wrażenie, że był on bardzo dominującym współautorem. Dopiero w kolejnych artykułach rola pani dr Małeckiej stała się najważniejsza.

Autoreferat w sposób zwięzły jest streszczeniem zgłoszonych 12. publikacji. Na jego końcu Habilitantka przedstawiła wszystkie możliwe wnioski płynące z tych artykułów. Jest ich 17. Nie sposób je wszystkie tutaj wymienić a moim zdaniem najciekawsze wymieniałem już wcześniej. Zdaniem recenzenta zabrakło trochę bardziej ogólnej refleksji natury chemicznej. Mimo to uważam, że pani dr Magdalena Małecka osiągnęła postawiony przed sobą cel – wniesienie własnego wkładu w poszerzenie wiedzy o wiązaniu wodorowym.

Uwagi końcowe

Przedstawiony mi do oceny dorobek naukowy świadczy jednoznacznie, że dr Magdalena Małecka rozwija samodzielnie własną tematykę badawczą. Wykazała się zdolnościami w zakresie trudnych technik eksperymentalnych, jest dobrym interpretatorem badań strukturalnych, świetnym i dociekliwym obserwatorem jak również organizatorem badań umiejącym nawiązywać współpracę naukową. Świadczy to o Jej dojrzałości naukowej i samodzielności w prowadzeniu badań.

Stwierdzam, że pani dr Magdalena Małecka spełnia ustawowe wymagania (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) stawiane kandydatom podczas ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, w dyscyplinie – chemia. W związku z tym stawiam wniosek o dopuszczenie Jej do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



