

CENTRUM BADAŃ MOLEKULARNYCH I MAKROMOLEKULARNYCH
POLSKA AKADEMIA NAUK
Zakład Chemii Heteroorganicznej
90-363 Łódź, Sienkiewicza 112

Tel.: (+48-42) 68 03 234
Fax: (+48-42) 684-71-26
E-mail: draj@bilbo.cbmm.lodz.pl

Prof. dr hab. Józef Drabowicz

AKADEMIA IM. JANA DŁUGOSZA

Katedra Chemii Organicznej
Aleja Armii Krajowej 13/15
42-200 Częstochowa

Łódź, dn. 28.12.2011 r.

OCENA

*cyklu 8 publikacji oryginalnych i opracowania przeglądowego
omawiających badania dr Marcina Kwita w tematyce „Oznaczenia konfiguracji absolutnej
związków konformacyjnie labilnych ” wraz z komentarzem
oraz Jego dorobku naukowego w związku z toczącym się przed Radą Wydziału Chemii Uniwersytetu
im. Adama Mickiewicza przewodem habilitacyjnym*

1. Dane o Kandydacie

Urodzony w 1974 roku Pan dr Marcin Kwit jest od października 2004 roku adiunktem w Zakładzie Stereochemii Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Jego związek z Wydziałem datuje się od chwili rozpoczęcia studiów chemicznych na macierzystej uczelni w październiku 1993 r. Zakończył je w roku akademickim 1997/1998, wykonując w ówczesnym Zakładzie Chemii Produktów Naturalnych, pod kierunkiem Pana prof. Jacka Gawrońskiego, pracę dyplomową zatytułowaną „*Difenimidy- molekularne propellery o indukowanej helikalności*”. Warto zauważyć, że została ona wyróżniona w pierwszym konkursie na najlepszą pracę magisterską wykonaną na Wydziale Chemii UAM.

W latach 1998-2003 mgr Marcin Kwit był słuchaczem wydziałowego Studium Doktoranckiego, kontynuując jednocześnie prace badawczą w Zespole opiekuna pracy dyplomowej i promotora realizowanej w tych latach rozprawy doktorskiej zatytułowanej „*Chiralne struktury z DACH-em*”. *Synteza i analiza spektroskopowa*”. Jej obrona odbyła się 13 maja 2003 r. O istotnej wartości naukowej wyników opisanych w rozprawie świadczy fakt, że została ona wyróżniona Nagrodą Prezesa Rady Ministrów w roku 2004. Warto dodać, że istotny fragment tych badań był realizowany w ramach grantu promotorskiego KBN, a wyniki zawarte w pracy doktorskiej stały się przedmiotem 7 publikacji w czasopismach chemicznych o uznanej reputacji w środowisku chemików-organików. Jedną z tych publikacji była do tej chwili cytowana ponad 80 razy. Warto również dodać, że Doktorant prowadził w tych latach również inne badania przedstawione w formie 3 publikacji oryginalnych (jedną z nich była w latach 2003-2006 najczęściej cytowanym artykułem opublikowanym w *Tetrahedron Asymmetry*) oraz uczestniczył w opracowaniu kilkunastu ćwiczeń laboratoryjnych z zaawansowanej chemii organicznej. Ich opisy zostały włączone to cieszącego się wielkim uznaniem środowiska akademickiego podręcznika zatytułowanego „*Współczesna synteza organiczna. Wybór eksperymentów*” (autorzy- J. Gawroński, K. Gawrońska, K. Kacprzak, M. Kwit- PWN, Warszawa 2004).

Po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych dr Marcin Kwit odbywa roczny (2003-2004) staż podoktorski w zespole znakomitego chemika holenderskiego prof. Bena L. Feringi z Uniwersytetu w Groningen. Był tym czasie, prowadząc badania nad syntezą „chiralnych molekularnych motorów” i „molekularnego przełącznika” opartego na odwracalnej, katalizowanej palladem, reakcji podstawienia nukleofilowego w położeniu allilowym, jednym z wykonawców grantu realizowanego w ramach 5 Programu Ramowego Unii Europejskiej.

Po zakończeniu stażu Habilitant zatrudniony zostaje z dniem 1 października 2004 r. na stanowisku adiunkta w macierzystym Zakładzie i na stanowisku tym pracuje do chwili obecnej. Poszerza w tym czasie realizowaną wcześniej tematykę badawczą o zagadnienia związane ze stereochemią związków makrocyklicznych i decyduje się podjąć badania stereochemiczne związków konformacyjnie labilnych. Osiem publikacji oryginalnych oraz artykuł przeglądowy opublikowany w „*Wiadomościach Chemicznych*” opisujących rezultaty tego drugiego fragmentu badań dotyczące konformacyjnie labilnych *trans*-izocytozasonów (otrzymanych przez Panią prof. M. Rozwadowską z macierzystego Wydziału i w grupie badawczej Pana prof. Dereka R. Boyda z Uniwersytetu w Belfaście -Północna Irlandia) zostały wykorzystane jako podstawa wniosku o przeprowadzenie procedury habilitacyjnej.

2. Cykl 8 publikacji oryginalnych oraz artykuł przeglądowy wraz z komentarzem

Dr Marcin Kwit przedstawił jako rozprawę habilitacyjną monotematyczny cykl 8 publikacji oryginalnych oraz 1 artykuł przeglądowy z tematyki określonej tytułem komentarza „*Oznaczenia konfiguracji absolutnej związków konformacyjnie labilnych*”. Opublikowane w 8 publikacjach oryginalnych i stanowiące merytoryczną podstawę rozprawy habilitacyjnej wyniki uzyskał Kandydat prowadząc w macierzystym Zakładzie, dla wspomnianych powyżej połączeń, analizę spektroskopową przy użyciu metod chiralooptycznych wraz z analizą obliczeniową opartą na współczesnych metodach chemii teoretycznej. Prace te opublikowane zostały w latach 2005-2011 w 5-ciu czasopismach chemicznych o międzynarodowym zasięgu i bardzo wysokich „współczynnikach oddziaływania-IF (J. Am. Chem. Soc.- 1 praca, Chem, Eur. J.- 2 prace, J. Org. Chem. i Org. Biomol. Chem – po 1 pracy, i Chirality - 3 prace). Wszystkie publikacje mają charakter wieloautorski. W dostarczonych do recenzji materiałach znajdują się oświadczenia współautorów określające ich „procentowe udziały” we wspólnie przygotowanych publikacjach. Wynika z nich, że „udział” Habilitanta miał charakter wiodący.

Dr Marcin Kwit przedstawił jako rozprawę habilitacyjną cykl publikacji z zakresu tematyki o istotnym znaczeniu dla współczesnej chemii organicznej jaką jest eksperymentalne i teoretyczne oznaczanie absolutnej konfiguracji związków chiralnych metodami chiralooptycznymi. Integralną część rozprawy habilitacyjnej stanowi liczący 47 stron druku i zaopatrzone w 84 odnośniki literaturowe wspomniany powyżej komentarz. Pełni on rolę przewodnika do opublikowanego cyklu „publikacji habilitacyjnych”, uzasadniając jednocześnie potrzebę i cel zrealizowanych badań oraz prezentuje osiągnięte wyniki. Zostały one zestawione w zamykającym merytorycznie komentarz do prac habilitacyjnych tekście „Podsumowanie i wnioski końcowe”. Wszystkie cztery wnioski przedstawione w tym tekście i zreasumowane poniżej przez piszącego recenzję należy uznać za równie istotne. Dotyczą one:

- a) wykazania determinującego wpływu heteroatomowego podstawnika w wybranych metabolitach arenów na ich konformację i widma ECD oraz w większości przypadków na skręcalność optyczną,
- b) uwzględnienia nieplanarności wiązań C=C na właściwości chiralooptyczne cykloheksadienonów i enonów,
- c) wykazania, że dla metabolitów arenów pochodnych dihydronaftalenów znak długofalowego efektu Cottona jest determinowany konformacją chromofora i w przypadku P-helikalkości chromofora znak efektu Cottona związanego z przejściem $\pi-\pi^*$ jest dodatni, co pozostaje w sprzeczności z akceptowaną regułą Crabbe,

d) rozważań nad stereoizomerią indukowaną poprzez generowania "chiralnego atomu tlenu" w konformerze pochodnej chinolinowej oznaczonej w tekście „Komentarza” numerem 13c.

Zapoznanie się serią publikacji oryginalnych omówionych w „Komentarzu” wykazuje, że podejmując opisane tam badania Habilitant włączył się w aktualną tematykę o istotnym znaczeniu poznawczym. O tym, że te badania doprowadziły do wyników o bardzo istotnej wartości poznawczej z zakresu wykorzystania metod obliczeniowych do określania absolutnych konfiguracji i konformacji związków konformacyjnie labilnych najlepiej świadczy fakt, że cykl 8 publikacji oryginalnych w których zaprezentowano te wyniki został wydrukowany w recenzowanych, czasopismach z tzw. „Listy Filadelfijskiej” o bardzo wysokim „współczynniku oddziaływania”. Powyższa ocena pozwala w konsekwencji na stwierdzenie, że opisane i przedyskutowane w rozprawie habilitacyjnej wyniki badań własnych zawierają wystarczająco duży element nowości naukowej aby mogły być podstawą wszczęcia przewodu o nadanie współautorowi cyklu ocenianych publikacji, Panu dr Marcinowi Kwitowi, stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych.

3. Dorobek naukowy poza cyklem „publikacji habilitacyjnych”

Poza 9 pracami stanowiącymi merytoryczną podstawę rozprawy habilitacyjnej Habilitant jest współautorem 33 publikacji oryginalnych. Uwzględniając czas gromadzenia, liczący 41 pozycji oryginalny dorobek publikacyjny należy uznać przynajmniej za bardzo bogaty. Habilitant jest również współautorem wspomnianych już w recenzji: artykułu przeglądowego w „Wiadomościach Chemicznych” i podręcznika akademickiego oraz rozdziału monograficznego włączonego do monografii „Comprehensive Chiroptical Spectroscopy” (edytorzy N. Berova, K. Nakanishi i P. Polavarapu- Wiley 2011). Należy również zwrócić uwagę [w czasach kiedy dane scjentometryczne zaczynają wpływać w coraz istotniejszy, choć często przeceniany, sposób na całościową ocenę dorobku naukowego], że dorobek ten charakteryzuje bardzo wysoki uśredniony „współczynnik oddziaływania „IF” równy 3.67.

Oceniając ten dorobek należy również zauważyć, że został on zrealizowany w macierzystym Zakładzie poczynając od roku 2000 w ramach kolejnych grantów KBN i MNiSzW w których Habilitant pełnił rolę kierownika (grant habilitacyjny), głównego wykonawcy (1 grant), oraz wykonawcy (5 grantów). Jestem pewien, że ten dorobek bardzo szybko stanie się dobrze rozpoznawalnym, powiększając bardzo szybko znaczącą już sumaryczną liczbę cytowań publikacji Kandydata [400 cytowań (289 bez autocytowań) – dane z bazy Scopus z maja 2011]. Do tej istotnej już rozpoznawalności prac Kandydata przyczynił się zapewne fakt, że były one

prezentowane na wielu międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych w ramach wykładów na zaproszenie (2), komunikatów konferencyjnych (5) i prezentacji plakatowych(4). Warto zauważyć, że fragmenty badań realizuje Kandydat przy współpracy z zagranicznymi i krajowymi zespołami naukowymi [grupy kierowane przez profesorów: D. R. Boyd (The Queen's University of Belfast), B. L. Feringa (University of Groningen), A. de Meijere (Universitat Gottingen), K. Ruud (University of Tromso) oraz M. Chmielewskiego (IChO PAN) oraz Panie prof. J. Frelek (IChO PAN) i prof. U. Rychlewską i prof. M. D. Rozwadowską z macierzystego Wydziału.

Merytoryczną wartość ocenianego dorobku naukowego podkreśla liczba nagród i wyróżnień jakimi został wyróżniony za działalność naukowo-badawczą Habilitant. Są wśród nich otrzymane w trakcie studiów: Stypendium Ministra Edukacji Narodowej (lata 1997-1998) oraz dyplom „Maxima cum laude” Wydziału Chemii UAM oraz nagrody i wyróżnienia otrzymane za badania realizowane w trakcie doktoratu i po doktoracie. Są wśród nich: Stypendium Naukowe Miasta Poznania (2003), Stypendium Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej (2004-2005), Nagroda Prezesa Rady Ministrów za pracę doktorską (2004), wyróżnienie do Nagrody PTChem im. W. Kemuli (2010) oraz zespołowe Nagrody Rektora macierzystego UAM (w latach 2003, 2007 i 2010).

4. Działalność dydaktyczno-organizacyjna

Od chwili podjęcia studiów doktoranckich i po pełnoetatowym zatrudnieniu w roku 2004 dr Marcin Kwit uczestniczy aktywnie w pracach o charakterze dydaktyczno-organizacyjnym macierzystego Wydziału. Od chwili zatrudnienia prowadził i prowadzi następujące zajęcia laboratoryjne lub seminaryjne do wykładów z poniższych przedmiotów:

- a) synteza asymetryczna (ćwiczenia laboratoryjne)
- b) synteza i struktura związków organicznych (ćwiczenia laboratoryjne)
- c) synteza organiczna (ćwiczenia laboratoryjne)
- d) chemia organiczna, cz. I (seminarium i ćwiczenia laboratoryjne)
- e) chemia organiczna, cz. II (seminarium i ćwiczenia laboratoryjne)
- f) związki organiczne w kosmetyce (ćwiczenia laboratoryjne)

Jest również autorem wykładu prezentowanego w ramach cyklu „Chemia w wielu wymiarach”.

W roku 1999 był członkiem Komitetu Organizacyjnego konferencji: 7th International Conference on Circular Dichroism (23-28 września 1999, Mierki, Polska)

5. Wniosek końcowy

Dr Marcin Kwit przedstawił jako podstawowy element rozprawy habilitacyjnej monotematyczny cykl 8 publikacjach oryginalnych o istotnej oryginalności naukowej z zakresu metod obliczeniowych. Opisane w niej badania poszerzają w istotnym stopniu możliwości wykorzystania analizy spektroskopowej przy użyciu metod chiralooptycznych popartej analizami obliczeniowymi jako wiarogodnej alternatywy dla wykorzystywanych do tej pory reguł empirycznych wiążących znak efektu Cottona w widmach elektronowego dichroizmu kołowego (ECD) i/lub znak skręcalności optycznej w widmach dyspersji skręcalności optycznej (ORD) z wybranym parametrem struktury analizowanego stereoizomeru. Poza rozprawą Habilitant zgromadził również bardzo wartościowy poznawczo i bardzo bogaty ilościowo dorobek naukowy. Uzyskane wyniki oraz forma ich opisu i dyskusji w publikacjach oryginalnych dowodzą, że rozprawa odpowiada w pełni warunkom określonym dla rozpraw habilitacyjnych przez artykuł 17 Ustawy o Stopniach i Tytule Naukowym oraz o Stopniach i Tytule w Zakresie Sztuki z dnia 14 marca 2003 roku. (Dz.U. nr 65, poz. 595 z 2003 roku ze zmianami w Dz.U. nr 164, poz.1365 z 2005 r.). Natomiast cały dorobek naukowy i dydaktyczno-organizacyjny Kandydata uzasadniają nadanie Mu stopnia doktora habilitowanego. W oparciu o powyższe konkluzje wnoszę do Wysokiej Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu o dopuszczenie Pana dr Marcina Kwita do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego i rozważenie (jeżeli istnieje taka możliwość) uznania przedstawionej pracy za wyróżniającą się rozprawę habilitacyjną.

