



Poznań, dnia 3 grudnia 2018 roku

Prof. dr hab. Marcin Hoffmann  
Wydział Chemii  
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu  
ul. Umultowska 89 b  
61-614 Poznań  
e-mail: mmh@amu.edu.pl  
tel.: 515095827

### OCENA

rozprawy habilitacyjnej (osiągnięcia naukowego) pt:  
*„Synteza, analiza strukturalna i spektroskopowa  
oraz modelowanie kwantowo-chemiczne soli i betain  
zawierających czwartorzędową grupę amoniową”*  
oraz dorobku naukowo-badawczego, dydaktycznego, popularyzatorskiego  
i organizacyjnego dr inż. Anny Komasy

Doktor inżynier Anna Komasa uzyskała stopień naukowy doktora nauk chemicznych w czerwcu 1997 roku. W lipcu 2018 roku wystąpiła z wnioskiem o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w zakresie nauk chemicznych. Otrzymana przeze mnie do recenzji dokumentacja przygotowana jest starannie, zgodnie z wymaganiami ustawowymi i zwyczajowymi, nie zawiera braków i nie wymaga uzupełnień. W mojej opinii umożliwia przeprowadzenie rzetelnej oceny kandydatury doktor inżynier Anny Komasy do stopnia naukowego doktora habilitowanego. Osiągnięcie habilitacyjne ma formę cyklu publikacji powiązanych tematycznie. Jedną z publikacji (H12) jest wyłącznie autorstwa dr inż. Anny Komasy, w pozostałych (H1-11 i H13-14) zgodnie z oświadczeniami współautorów wydzielone zagadnienia są indywidualnym wkładem osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

## OSIĄGNIĘCIA NAUKOWO-BADAWCZE HABILITANTKI

Dr inż. A. Komasa opublikowała łącznie 66 prac, z czego 54 w czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej (JCR), w tym 60 po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Wyniki prowadzonych przez nią badań naukowych zostały zacytowane ponad 600 razy a bez autocytowań prawie 550 razy. Indeks H wynosi 11 (za Web of Science). Habilitantka już trzy razy przedstawiała wykłady na konferencjach naukowych, recenzowała publikacje dla czasopisma Journal of Molecular Structure. Była koordynatorem uczelnianym i dysponent środków finansowych z ramienia UAM w projekcie Pol-Nor/203119/32/2013 „Superior bio-friendly systems for enhanced wood durability” finansowanym z Funduszy Norweskich (Norway Grants) we współpracy z Uniwersytetem Przyrodniczym w Poznaniu i Norwegian Forest and Landscape Institute.

Publikacje z cyklu habilitacyjnego (H1-H14) są ze sobą powiązane tematycznie. W jednej z nich jest jedynym autorem (H12), a z wyjątkiem jednej (H1) jej wkład w powstanie pozostałych – zgodnie z oświadczeniami współautorów – przekracza 50%. Rzeczywiście w przypadku kilku prac (H3, H4, H6, H8, H9), których autorami jest pięciu naukowców, a Habilitantka nie jest pierwszym autorem, przypisywanie Habilitantce 65%-70% udziału wydaje się problematyczne. Jednak opis wkładu pracy Habilitantki nie budzi wątpliwości, a określenie wkładu procentowego w tym przypadku na poziomie 20% nie zmienia faktu o istotnym zaangażowaniu Habilitantki w otrzymanie wartościowych naukowo wyników. Tak więc rola Habilitantki przy powstawaniu tych prac nie ulega wątpliwości. Sumaryczny Impact Factor wynosi 25.88, średni na pracę 1.85. Suma punktów MNiSW wynosi 335, średnia liczba punktów na pracę 23.9.



Jak określa to Habilitantka: „Głównym celem badań prezentowanych jako osiągnięcie habilitacyjne było otrzymanie związków o zróżnicowanej strukturze i właściwościach fizykochemicznych oraz charakterystyka występujących w nich wiązań wodorowych  $O-H\cdots O$ ,  $N-H\cdots O$ ,  $OH\cdots X$  oraz  $C-H\cdots X$  (gdzie  $X$ =halogen), jak również oddziaływań elektrostatycznych. Betainy i związki zwitterjonowe są doskonałymi układami modelowymi do badania takich oddziaływań. Zrozumienie wpływu wiązań wodorowych na strukturę i aktywność cząsteczek jest istotne przy projektowaniu i modelowaniu układów o znaczeniu biologicznym. Jako obiekt badań wybrałam związki z czwartorzędowym atomem azotu występującym w zróżnicowanym strukturalnie otoczeniu. Są to analogi aminokwasów, betainy będące pochodnymi aminokwasów lub betainy mezomeryczne”.

Na uznanie zasługuje fakt umiejętnego połączenia przez Habilitantkę różnych technik badawczych począwszy od syntezy badanych związków, spektroskopii w podczerwieni, NMR, UV-Vis oraz obliczeń kwantowo-chemicznych co pozwoliło osiągnąć postawione przez Habilitantkę cele. W toku prowadzonych badań opracowano metody syntezy soli i betain zawierających czwartorzędową grupę amoniową, w tym soli pirydyniowych i bispirydyniowych oraz ich kompleksów w tym kompleksów kwasu 4-piperidynokarboksylowego z kwasami i fenolem [H1-H3], kompleksów dimetylofenylobetainy i 4-N,N,N-trimetyloamoniobenzoesu z kwasami i fenolem [H4-H7], kompleksów betain pochodnych 3-hydroksypirydyny z kwasami mineralnymi i organicznymi [H8-H10], podwójnych soli 3-hydroksy- i 3-hydroksymetylopirydyniowych z łącznikiem polimetylenowym [H11-H13], soli związków bispirydyniowych z halogenkami metali [H14]. Opisano typy oddziaływań determinujących strukturę cząsteczek w badanych związkach, a dodatkowe wykorzystanie porównań widm w podczerwieni związków z wiązaniem wodorowym przed i po ich deuterowaniu pozwoliło wskazać na moc wiązania wodorowego oraz pomogło zidentyfikować pasma drgań zginających

grupy protono-donorowej [H1-H2,H5-H9,H11,H12]. Jako istotną zaletę należy ocenić wykorzystanie wyników obliczeń kwantowo-chemicznych do modelowania widm IR,  $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR oraz UV-Vis [H3-H14].

*Podsumowując cykl prac, przedstawiony przez p. dr inż. Annę Komasę jako osiągnięcie naukowe w postępowaniu habilitacyjnej spełnia, moim zdaniem, wszystkie wymogi - zarówno formalne, jak i zwyczajowe stawiane w tego rodzaju postępowaniach. Cykl prac jest interesujący, znajduje oddźwięk w literaturze naukowej i wnosi istotny wkład w poznanie i wyjaśnienie zjawisk związanych z wyjaśnianiem wpływu wiązań wodorowych na strukturę i aktywność cząsteczek związków z czwartorzędowym atomem azotu występującym w zróżnicowanym strukturalnie otoczeniu. Na szczególne uznanie zasługuje też liczba cytowań publikacji współautorstwa Habilitantki (przekraczająca 600) pokazująca, że osiągnięcia te weszły na dobre do światowego obiegu myśli.*

## DOROBEK DYDAKTYCZNY I POPULARYZUJĄCY NAUKĘ

Dr inż. A. Komasa prowadziła zajęcia dla studentów chemii różnych specjalności, prowadziła bądź prowadzi następujące zajęcia:

- Podstawy chemii organicznej laboratorium
- Chemia organiczna laboratorium
- Materiały biomedyczne laboratorium
- Metody spektroskopowe w analizie kryminalistycznej laboratorium
- Metody analizy instrumentalnej w kryminalistyce laboratorium
- Środki ochrony roślin laboratorium
- Biochemia z elementami biologii laboratorium
- Ćwiczenia rachunkowe z podstaw chemii



- Chemia organiczna proseminarium
- Metody spektroskopowe w chemii organicznej proseminarium

Na szczególne uznanie zasługuje fakt jej udziału w powstawaniu nowej specjalności studiów chemicznych: chemii sądowej. Jest bowiem kierownikiem laboratorium z metody spektroskopowych w analizie kryminalistycznej i z metod analizy instrumentalnej w kryminalistyce. Brała też udział w popularyzacji chemii dla szkół średnich w ramach „Pracowni Chemicznej”, czy współudział w „Drzwiach Otwartych” dla uczniów szkół średnich.

*Podsumowując ten obszar aktywności dr inż. A. Komasy dorobek dydaktyczny i popularyzujący naukę uznać należy za szeroki i satysfakcjonujący.*

## WSPÓŁPRACA MIĘDZYNARODOWA

Jak już wspomiano dr inż. A. Komasa była koordynatorem uczelnianym i dysponent środków finansowych z ramienia UAM w projekcie Pol-Nor/203119/32/2013 „Superior bio-friendly systems for enhanced wood durability” finansowanym z Funduszy Norweskich (Norway Grants) we współpracy z Uniwersytetem Przyrodniczym w Poznaniu i Norwegian Forest and Landscape Institute. Głównym celem projektu badawczego “Superior bio-friendly systems for enhanced wood durability” realizowanym w latach 2013-2017 było opracowanie metod zwiększenia trwałości produktów z drewna dzięki zastosowaniu coraz doskonalszych środków oraz poszukiwanie skutecznych i ekologicznych metod ochrony drewna. Drewno jest bowiem naturalnym polimerem organicznym i odnawialnym surowcem, jednak degradacja drewna pod wpływem czynników abiotycznych i biotycznych jest główną przyczyną ograniczeń w zastosowaniu tego

surowca. W toku realizacji projektu uzyskano dobre impregnaty, zapewniających skuteczną ochronę produktów z drewna, co jest ważne ze względów ekonomicznych, środowiskowych i ekologicznych.

*Podsumowując ten obszar aktywności dr inż. A. Komasy należy ocenić wysoko pokazuje bowiem, że Habilitantka potrafi z sukcesem wziąć udział pozyskiwaniu środków na badania naukowe we współpracy międzynarodowej.*

## INNE

Na pozytywne podkreślenie zasługuje odkrycie iż dibromki 3-hydroksy- i 3-hydroksymetylopirydyniowe oraz monobetaina wykazały silniejsze działanie inhibicyjne względem niektórych grzybów pleśniowych niż substancja referencyjna - chalkon [H13].

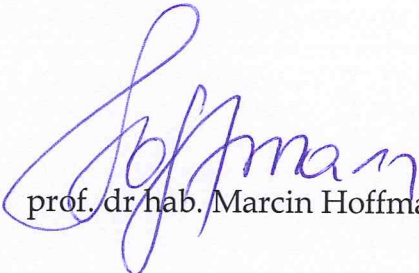
---

## WNIOSKI i PODSUMOWANIE

Wysoko oceniam aktywność naukową dr inż. Anny Komasy oraz inne aspekty jej działalności. Cykl publikacji naukowych stanowiący osiągnięcie naukowe – szczególnie prace z trzech ostatnich lat wskazują na samodzielność Habilitantki oraz na zbudowanie przez nią rozwiniętego i zróżnicowanego warsztatu naukowego do realizacji starannie zaplanowanych prac badawczych istotnych dla rozwoju chemii jako nauki. Habilitantka wydaje się już być samodzielnym pracownikiem naukowym, a więc stopień naukowy doktora habilitowanego jest tylko potwierdzeniem tego faktu. Habilitantka wniosła istotny wkład w poznanie i wyjaśnianie zjawisk związanych z wpływem wiązań wodorowych na strukturę



i aktywność cząsteczek związków organicznych z czwartorzędowym atomem azotu występującym w zróżnicowanym strukturalnie otoczeniu. Kompetencje naukowe dr inż. Anny Komasy sugerują dalszy rozwój Jej kariery naukowej. Kandydatka publikuje w dobrych czasopiśmie, a jej prace są dostrzegane w skali światowej. Reasumując stwierdzam, że dorobek Habilitantki spełnia bez zastrzeżeń wymagania prawne i zwyczajowe stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego w zakresie nauk chemicznych.



prof. dr hab. Marcin Hoffmann