



UNIWERSYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



80-952 Gdańsk, ul. J. Sobieskiego 18, tel. (+48 58) 523 5331, fax (+48 58) 523 5464, e-mail: bla@chem.ug.edu.pl,
www.chem.ug.edu.pl

Prof. dr hab. inż. Jerzy Błażejowski
profesor zwyczajny

Gdańsk, 24 stycznia 2013 roku

Ocena

osiągnięć naukowo-badawczych oraz w zakresie kształcenia, współpracy międzynarodowej i popularyzacji wiedzy dr inż. Jadwigi Anny Lorenc w związku z wszczęciem postępowania o nadanie jej stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych i dyscyplinie chemia

Pani Jadwiga Anna Lorenc ukończyła kierunek studiów chemia na Wydziale Chemicznym Politechniki Wrocławskiej w 1976 roku. W maju 2000 roku obroniła rozprawę doktorską zatytułowaną „Badania spektralne i dipolometryczne nitrowych pochodnych 2-alkiloaminopikolin i ich N-tlenków”, której promotorem była dr hab. inż. Aniela Puszek. Od 1980 roku związana jest z Katedrą (Zakładem) Chemii Bioorganicznej (Chemii Organicznej) Akademii Ekonomicznej im. Oskara Langego we Wrocławiu (obecnie Uniwersytetu Ekonomicznego we Wrocławiu) jako: asystent (1980–1988), specjalista (1988–2006) i adiunkt (od 2006). Drugiego lipca 2012 roku złożyła dokumentację wymaganą do przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego. Na tej podstawie Centralna Komisja do spraw Stopni i Tytułów (CK) wszczęła postępowanie habilitacyjne (w dniu 6 grudnia 2012) i wskazała Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu za odpowiednią do przeprowadzenia wyżej wymienionego postępowania.

Zasadniczą częścią autoreferatu habilitantki jest opis 12 autorskich (2) lub współautorskich (10) prac naukowych z zakresu spektroskopii i chemii fizycznej, opublikowanych w specjalistycznych czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym (referowanych w bazie *ISI Web of Knowledge*), pod wspólnym tytułem „Właściwości spektroskopowe i strukturalne aminowych i nitrowych pochodnych pirydyny, ich N-tlenków i

soli". Opis ten liczy 43 strony (tekstu 40 stron) i odwołuje się do 94 publikacji oryginalnych i przeglądowych, w tym 12 włączonych w cykl habilitacyjny. Opis podzielony został na rozdziały: wstęp oraz dotyczące struktury krystalicznej (ustalonej metodą dyfraktometryczną po raz pierwszy), wiązań wodorowych (zidentyfikowanych w oparciu o badania spektralne i dyfraktometryczne), tautomerii prototropowej (badanej metodami spektralnymi i obliczeniowymi), przemian fazowych w fazie stałej (badanych metodami termooanalitycznymi i spektralnymi), wymuszonego efektu ramanowskiego w fazie stałej, spektroskopii elektronowej w fazach skondensowanych, adekwatności stosowanych metod obliczeniowych i wpływu podstawników na położenie wybranych sygnałów w widmach IR. Opis kończy podsumowanie uwypuklające najważniejsze osiągnięcia 12 powyżej przywołanych prac.

Celem przewodnim badań opisanych w 12 publikacjach cyklu habilitacyjnego było:

- (i) ustalenie struktury związków w krystalicznej fazie stałej,
- (ii) określenie cech spektralnych związków,
- (iii) poznanie oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych w fazie ciekłej i krystalicznej fazie stałej,
- (iv) określenie roli wiązań wodorowych w stabilizacji struktury krystalicznej związków oraz
- (v) zbadanie możliwości występowania zjawiska tautomerii prototropowej w badanych połączeniach.

Do badań pochodnych pirydyny i ich nadtlenków, zawierających podstawniki elektrono-donorowe lub elektrono-akceptorowe usytuowane w różnych miejscach pierścienia pirydynowego habilitanta wykorzystano metody: spektralne (UV-Vis (absorpcyjne i emisyjne, IR, Ramana), dyfraktometryczne, termooanalityczne (DSC) i obliczeniowe (chemii kwantowej)).

Główne osiągnięcia prac dołączonych do cyklu habilitacyjnego scharakteryzowane są poniżej.

- Opracowanie i opisanie metod syntezy oraz otrzymanie szeregu związków wywodzących się od pirydyny, w tym N-tlenków.
- Określenie – po raz pierwszy – struktury 7 związków (w tym 2 N-tlenków pirydyny) w krystalicznej fazie stałej.
- Ustalenie, że w związkach badanych pojawia się zjawisko tautomerii prototropowej; 1,2,3-triazolo[4,5-b] pirydyny pojawiają się w jednej lub dwóch formach tautomerycznych, a metylowe pochodne 5-nitro-2-tiolopirydyny – w jednej formie tautomerycznej, tionowej.

- Scharakteryzowanie i opisanie wiązań wodorowych typu: O–H···O, N–H···O, N–H···N i N–H···S występujących w fazach skondensowanych.
- Zidentyfikowanie i opisanie przemian fazowych typu porządek–nieporządek w kryształach 2-piperydylo-5-nitro-6-metylopirydyny oraz trifluorooctanu 2-amino-4-nitropirydyniowego.
- Zidentyfikowanie oraz scharakteryzowanie natury i symetrii modu (pierścień adamantylowy–NH–pierścień pirydynowy) promującego efekt wymuszonego rozpraszania Ramana w kryształach adamantyloamino-5-nitropirydyny.
- Wykazanie użyteczności kwantowo-chemicznych metod obliczeniowych w przewidywaniu częstości wibracyjnych oraz interpretacji widm IR i Ramana, a także analizie zjawiska tautomerii prototropowej i oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych.
- Stwierdzenie wpływu: środowiska i wewnątrzcząsteczkowych wiązań wodorowych na elektronowe widma absorpcyjne nitropikolin i ich nadtlenków oraz zmian strukturalnych na widma absorpcyjne i emisyjne związków.
- Wykazanie znaczącego wpływu wewnątrz- i międzycząsteczkowych wiązań wodorowych na strukturę i właściwości fizykochemiczne badanych połączeń.

Publikacje habilitantki (po uzyskaniu stopnia naukowego doktora) omówione w autoreferacie, poza 12 stanowiącymi osiągnięcie naukowe (o którym mowa w art. 16 ustawy o stopniach i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki) dające podstawę nadania stopnia doktora habilitowanego, dotyczą:

- (i) poszukiwania materiałów (laserujących), w których może być generowane wymuszone rozpraszanie Ramana,
- (ii) spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego pochodnych N-tlenku 4-nitropirydyny (interesujących pod kątem aktywności biologicznej),
- (iii) syntezy i określania struktury unikatowych związków zawierających ugrupowanie cyjanowe mogących wykazywać nieliniowe właściwości optyczne bądź interesujących pod kątem aktywności biologicznej.

Habilitantka jest jedynym autorem 2 prac z 12 stanowiących osiągnięcie naukowe dające podstawę nadania stopnia doktora habilitowanego. W pozostałych 10 wieloautorskich pracach występuje 6-krotnie jako autor korespondencyjny. Oświadczenia współautorów dołączone do dokumentacji wskazują na wiodącą jej rolę w 12 publikacjach, o których mowa powyżej. Dane liczbowe odnośnie procentowego udziału autorów w publikacjach są

formalnie zgodne (sumują się do 100%), budzi jednak niejasności fakt deklarowania przez współautorów niskiego udziału procentowego (szczególnie w przypadku publikacji, w której habilitantka nie występuje jako autor korespondencyjny lub pierwszy autor).

Łączne osiągnięcia naukowe habilitantki obejmują 32 publikacje autorskie (2) lub współautorskie (30) w czasopismach o zasięgu międzynarodowym (w tym 4 prace, które ukazały się w okresie przed uzyskaniem stopnia doktora) oraz 11 prezentacji na konferencjach naukowych – w tym 5 przed uzyskaniem stopnia doktora.

Dane scjentometryczne zaczerpnięte z bazy *ISI Web of Knowledge* (stan na 24 stycznia 2013 roku) są następujące: liczba publikacji habilitantki referowanych tamże – 32, łączna liczba cytowań – 124 (bez autocytowań – 92), średni wskaźnik cytowań na pracę – 3,88, indeks Hirscha (H) – 6. W materiałach dołączonych do wniosku dane są następujące: liczba publikacji – 31, IF – 61,775, całkowita liczba cytowań – 122 (bez autocytowań – 94); indeks H – 6 (stan na 28 czerwca 2012 roku). Z powyższych danych wynika, że publikacje habilitantki są dostrzegane przez międzynarodową społeczność naukową. Ich cytowalność, średnio 3,94 na pracę, sięga IF dobrze notowanych czasopism specjalistycznych o zasięgu międzynarodowym. Niezły wskaźnik (1,99) uzyskuje się dzieląc sumaryczny IF przez liczbę publikacji.

Redakcje czasopism naukowych: *Journal of Molecular Structure* i *Spectrochimica Acta Part A* zwracały się do habilitantki o przygotowanie recenzji (łącznie 3) nadsyłanych prac.

Habilitantka uczestniczyła w przygotowaniu do druku materiałów 6 konferencji naukowych – krajowych i międzynarodowych.

Kandydatka nie odbyła staży naukowych w ośrodkach zagranicznych i krajowych. Uczestniczy natomiast w badaniach realizowanych przez międzynarodowe konsorcjum naukowe w ramach projektu „Lasery ramanowskie – nowe materiały optyki nieliniowej”. W skład konsorcjum wchodzi 2 jednostki z Polski, w tym Katedra Chemii Bioorganicznej z Wydziału Inżynieryjno-Ekonomicznego Uniwersytetu Ekonomicznego we Wrocławiu, 1 jednostka z Federacji Rosyjskiej, 2 jednostki z Japonii, 3 jednostki z Republiki Federalnej Niemiec, 1 jednostka z Hiszpanii, 1 jednostka ze Szwajcarii i 1 jednostka z Austrii. Efektem badań naukowych realizowanych przez habilitantkę w ramach wyżej wymienionego konsorcjum jest 6 publikacji w czasopismach o zasięgu międzynarodowym.

Habilitantka legitymuje się osiągnięciami w zakresie działalności dydaktycznej i organizacyjnej. Prowadziła lub prowadzi wykłady z chemii organicznej, biochemii i chemii żywności, zajęcia laboratoryjne z chemii organicznej i biochemii oraz seminaria dyplomowe

na studiach I stopnia. Sprawowała opiekę nad studentami przygotowującymi prace inżynierskie – łącznie 27. Jest autorem rozdziałów (łącznie 3) w dwóch skryptach zatytułowanych: „Ćwiczenia laboratoryjne z chemii organicznej” oraz „Ćwiczenia laboratoryjne z biochemii i chemii żywności”. Zorganizowała w uczelni laboratorium syntezy organicznej, stanowiska pomiaru momentów dipolowych oraz pracownię pomiaru elektronowych widm absorpcyjnych. Promowała i wdrażała nowe programy obliczeniowe. Była członkiem Rady Naukowej Wydziału Inżynieryjno-Ekonomicznego w kadencji 2008–2012.

Została uhonorowana nagrodą zespołową Ministra Edukacji Narodowej i Sportu w 2005 roku oraz dwiema indywidualnymi Nagrodami Rektora Uniwersytetu Ekonomicznego we Wrocławiu (II stopnia w 2010 roku i I stopnia w 2011 roku) za wyróżniającą aktywność naukowo-badawczą.

W rozwoju naukowym habilitantki można wyróżnić okres nikłej aktywności badawczej – do roku 1998 – oraz zwiększonej aktywności naukowej – po 1998 roku. Jej dorobek przedstawiony jako osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę do nadania stopnia doktora habilitowanego pochodzi z lat 2002–2012, z więc drugiego z wymienionych powyżej okresów. Habilitantka – poprzez badania skupione na syntezie i wykorzystaniu metod spektralnych, dyfraktometrycznych, termooanalitycznych i obliczeniowych – wniosła dostrzegalny wkład w poszerzanie wiedzy dotyczącej właściwości i zachowania pochodnych pirydyny i ich nadtlenków, oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych występujących w tych połączeniach w fazach skondensowanych oraz zjawiska tautomerii prototropowej pojawiającego się w tychże fazach. Rysują się perspektywy wykorzystania otrzymanych przez habilitantkę połączeń w optyce nieliniowej i farmaceutyce. Te przesłanki przemawiają za uznaniem jej osiągnięć naukowo-badawczych oraz w zakresie kształcenia, współpracy międzynarodowej i popularyzacji wiedzy za wystarczające do nadania stopnia doktora habilitowanego.

Kandydatka jest dostrzegana przez międzynarodową społeczność naukową poprzez publikowanie prac w czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Uczestniczy w realizacji dużego międzynarodowego projektu badawczego. Jej publikacje są rozpoznawalne i cytowane. Wykazała, że umie sformułować problem naukowy i rozwiązać go samodzielnie lub w zespole. Zdobyła kwalifikacje do samodzielnego prowadzenia badań i nauczania na poziomie akademickim. Są zatem spełnione wymogi ustawowe (w świetle ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 roku (Dz. U. Nr 65 poz. 595, z późn. zm. – Dz. U.: Nr 164 poz. 1365 z 2005 roku, Nr 96

poz. 620 i Nr 182 poz. 1228 z 2010 roku oraz Nr 84 poz. 455 z 2011 roku), a także rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 22 września 2011 roku w sprawie szczegółowego trybu i warunków przeprowadzania czynności w przewodach doktorskich i postępowaniu habilitacyjnym oraz w postępowaniu o nadanie tytułu profesora (Dz. U. Nr 204 poz. 1200)) oraz zwyczajowe nadanie dr inż. Jadwidze Annie Lorenc stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych w dyscyplinie chemia.

Wnoszę o kontynuowanie postępowania w sprawie nadania jej najwyższego stopnia naukowego.

