

dr Elżbieta Bartoszak-Adamska

AUTOREFERAT

do wniosku o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego

Osiągnięcia naukowe zgłoszone do postępowania habilitacyjnego
przedstawiają
monotematyczny cykl 14 publikacji naukowych wydanych po uzyskaniu
stopnia naukowego doktora

Temat cyklu prac: „**Wiązania wodorowe a konformacja i aranżacja
cząsteczek w kryształach organicznych**”

Poznań, wrzesień 2012

1. IMIĘ I NAZWISKO: **Elżbieta Bartoszak-Adamska**

2. POSIADANE DYPLOMY I STOPNIE NAUKOWE

- Magister chemii (1987)
promotor: prof. dr hab. Mariusz Jaskólski
Wydział Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
Studia ukończone z wyróżnieniem
- Stopień doktora nauk chemicznych w zakresie chemii (maj 1996)
tytuł rozprawy doktorskiej:
„Badania strukturalne soli diamin alifatycznych i aromatycznych”
promotor: prof. dr hab. Mariusz Jaskólski
Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Praca uznana przez Radę Wydziału za najlepszą wśród wyróżnionych prac doktorskich obronionych na Wydziale Chemii UAM w 2006 roku i nominowana do Nagrody Jego Magnificencji Rektora UAM.

3. INFORMACJE O DOTYCHCZASOWYM ZATRUDNIENIU
W JEDNOSTKACH NAUKOWYCH:

- 1987-1989 chemik w Zakładzie Krystalografii, Wydział Chemii UAM
- 1989-1996 asystent w Zakładzie Krystalografii, Wydział Chemii UAM
- 1996- obecnie adiunkt w Zakładzie Krystalografii, Wydział Chemii UAM

4. ZAGRANICZNE STAŻE NAUKOWE

- wrzesień - listopad 1989 Uppsala University, Szwecja
- wrzesień - grudzień 1990 Uppsala University, Szwecja
- sierpień - grudzień 1991 Uppsala University, Szwecja
- listopad 1999 (dwa tygodnie) Ośrodek Synchrotronowy, EMBL/DESY, Hamburg, Niemcy

5. DOROBK NAUKOWY

- | | |
|--|----|
| • Liczba publikacji: | 32 |
| • Liczba prac opublikowanych przed doktoratem: | 6 |
| • Liczba prac opublikowanych po doktoracie: | 26 |
| • Liczba publikacji w czasopismach znajdujących się w bazie JCR: | 29 |
| • Liczba komunikatów ustnych i posterowych: | 46 |

6. SUMMARYCZNY *impact factor* (IF) publikacji naukowych według listy Journal Citation Reports (JCR): **46,1**

7. CAŁKOWITA LICZBA CYTOWAŃ PUBLIKACJI według bazy Web of Knowledge: **243**
• bez autocytaowań (dane z 12. września 2012): **227**

8. INDEKS HIRSCHA według bazy Web of Knowledge: **9**

Autoreferat

9. MIĘDZYKRAJOWA WSPÓŁPRACA NAUKOWA:

- Prof. Ivar Olovsson, Uppsala University, Szwecja
- Dr. Torbjörn Gustafsson, Uppsala University, Szwecja
- Dr. Roland Tellgren, Uppsala University, Szwecja
- Dr. Ashwani Nangia, University of Hyderabad, Indie
- Dr. Grigorij Dmytriv, Ivan Franco L'viv National University, Lwów, Ukraina
- Dr. Siergiej Vdovienko, IBOCh, Ukrainian Academy of Sciences, Kijów, Ukraina
- Dr. Ashwani Vij, Air Force Research Laboratory, Edwards AFB, USA

6. WSPÓŁPRACA NAUKOWA W KRAJU:

- Prof. Maciej Wiewiórowski, IChB, PAN, Poznań
- Prof. Zofia Dega-Szafran, Wydział Chemii, UAM
- Prof. Mirosław Szafran, Wydział Chemii, UAM
- Prof. Bogumił Brzeziński, Wydział Chemii, UAM
- Prof. Lechosław Łomozik, Wydział Chemii UAM
- Dr hab. Jacek Wójcik, IBB Warszawa
- Prof. Marek Figlerowicz, IChB, PAN, Poznań
- Prof. Eugeniusz Grech, Zachodniopomorski Uniwersytet Techniczny, Szczecin
- Prof. Grzegorz Bujacz, Dr Anna Bujacz, IBT, Politechnika Łódzka, Łódź
- Prof. Marek Potrzebowski, CBMM, PAN, Łódź
- Prof. IChB Joanna Zeidler, IChB PAN, Poznań
- Prof. Lucjusz Zaprutko, Uniwersytet Medyczny, Poznań

7. UDZIAŁ W GRANTACH I PROJEKTACH BADAWCZYCH:

- grant MEN P/03/107/90-2

okres realizacji: 19.12.1990-30.04.1991

temat: *Rentgenograficzne badania strukturalne gąbki protonowej,*

kierownik grantu: prof. dr hab. Mariusz Jaskólski

charakter udziału: główny wykonawca

- grant KBN, nr 3T09A01817,

okres realizacji 01.07.1999-30.06.2002,

temat: *Kooperatywny ruch protonów i kationów metali w układach biologicznych i układach modelowych,*

kierownik grantu: prof. dr hab. Bogumił Brzeziński

charakter udziału: wykonawca

- W latach 2009 - 2010 w ramach współpracy naukowej z prof. IChB Joanną Zeidler, kierownikiem grantu NN 405 2516 33, pt. „*Nukleozydy i pronukleotydy pochodnej 1,2,3-triazolu jako prekursorzy inhibitorów dehydrogenazy 5'-monofosforanu inozyny*”, prowadziłam badania w celu poznania struktury molekularnej i krystalicznej pochodnej 1,2,3-triazolonukleozydu oraz roli wiązań wodorowych podczas parowania zasad organicznych w kryształach. Rezultaty moich badań przedstawiłam we wspólnej publikacji zamieszczonej w *Bioorganic and Medicinal Chemistry*.

- Na podobnej zasadzie brałam udział w następujących projektach badawczych:

Autoreferat

- Grant KBN No. 3 T09A 151 19
okres realizacji: 2000-2003,
temat: *Oddziaływania międzycząsteczkowe i koordynacyjne w układach jonów metali, poliamin i nukleotydów.*
kierownik grantu: prof. dr hab. Lechosław Łomozik
- Grant KBN No. 4 T09A 100 25
okres realizacji: 13.11.2003 – 12.11.2004,
temat: *Nowe czwartorzędowe sole pirydyniowe i ich ylidy.*
kierownik grantu: prof. dr hab. Mirosław Szafran

Koszty wyżej wymienionych badań (utrzymanie dyfraktometrów i zakup wyposażenia) były finansowane ze środków statutowych grupy badawczej prof. Jaskólskiego, w której pracuję. Fundusze te były przyznawane za publikacje (głównie z listy filadelfijskiej) zgodnie z obowiązującym na Wydziale Chemii UAM algorytmem.

8. OTRZYMANE NAGRODY I WYRÓŻNIENIA

- Nagroda Jego Magnificencji Rektora UAM II stopnia za działalność naukową, dydaktyczną i organizacyjną, 2007

9. UDZIAŁ W PRACACH KOMITETÓW ORGANIZACYJNYCH KONFERENCJI MIĘDZYNARODOWYCH:

- Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyna, lipiec 1992
- Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyna, sierpień 1994
- Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyna, sierpień 1997
- Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyna, sierpień 2001

I KRAJOWYCH:

- Krysztaly Organiczne, wrzesień 1998, Poznań
- Współorganizacja studenckich sesji naukowych w latach 2006-2012 na Wydziale Chemii UAM

10. CZŁONKOWSTWO ORGANIZACJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

- Polskie Towarzystwo Krystalograficzne od 2010

11. DZIAŁALNOŚĆ POPULARYZATORSKA

- W ramach *Drzwi otwartych* na Wydziale Chemii UAM prowadzenie zajęć z rentgenografii i krystalografii dla uczniów szkół średnich (1996-2005)
- Członek Rady Programowej Uniwersytetu Trzeciego Wieku od 2010
- Wykład dla ponad 120 studentów Uniwersytetu Trzeciego Wieku w Szamotułach pt. *Symetria w przyrodzie, sztuce i w nauce*, kwiecień 2010

12. DZIAŁAŁOŚĆ ORGANIZACYJNA

- W 1997 roku współorganizowałam pierwsze w Polsce centrum egzaminacyjne Uniwersytetu Londyńskiego dla studiujących w trybie *distance-learning*. Przez kilka kolejnych lat przeprowadzałam egzaminy na Wydziale Chemii UAM, zgodnie z wymogami Uniwersytetu Londyńskiego, dla uczestników następujących kursów Advanced Certificate:

Autoreferat

- *Principles of Protein Structure*
- *Protein Crystallography*

- W ramach programu SOCRATES-ERASMUS i współpracy z Birkbeck College (University of London) uczestniczyłam w organizowaniu kursu „Bioinformatics and Structural Genomics” na Wydziale Chemii (marzec 2003), Biologii (marzec 2004), Fizyki (maj 2005) Uniwersytetu A. Mickiewicza oraz na Uniwersytecie Przyrodniczym w Poznaniu (2011).
- Pełnienie obowiązków organizacyjnych w zastępstwie kierownika grupy badawczej w następujących okresach:
 - styczeń - kwiecień 2005
 - kwiecień - maj 2007
 - grudzień 2008 - styczeń 2009.
- Udział w szkoleniach i opracowanie sylabusów zgodnie z wymogami Krajowych Ram Kwalifikacji (2011, 2012).

13. DZIAŁALNOŚĆ DYDAKTYCZNA

- opieka nad magistrantami (8),
- opieka dydaktyczno-naukowa nad stażystami zagranicznymi (4) i z kraju (5)
- opieka dydaktyczna nad doktorantami (6) rozpoczynającymi prowadzenie zajęć w Zakładzie Krystalografii, Wydział Chemii UAM
- kierownik ćwiczeń laboratoryjnych z krystalografii (1992-2008) i krystalochemii oraz biokrystalografii (2005-2011)

14. PROWADZONE ZAJĘCIA DYDAKTYCZNE

- ćwiczenia laboratoryjne z krystalografii dla studentów chemii podstawowej, chemii środowiska,
- ćwiczenia laboratoryjne z biokrystalografii dla biotechnologów, bioinformatyków oraz biologów molekularnych
- ćwiczenia laboratoryjne z chemii fizycznej dla chemii podstawowej i środowiska
- ćwiczenia laboratoryjne z chemii organicznej dla biologów
- ćwiczenia specjalistyczne z rentgenografii dla magistrantów Zakładu Krystalografii
- ćwiczenia laboratoryjne z krystalochemii dla chemii podstawowej, kosmetycznej i biologicznej

Powyższe zajęcia prowadziłam w wymiarze 210-330 godzin rocznie.

Miałam okazję i przyjemność poprowadzić wykład z krystalografii dla studentów chemii oraz wykłady z biokrystalografii dla biotechnologów i biologów molekularnych w ramach wcześniej zaplanowanych zastępstw. Zwyczajowo na Wydziale Chemii UAM prowadzenie wykładów i promotorstwo prac magisterskich i doktorskich powierzane jest profesorom tytularnym i uczelnianym. Adiunkci w wyjątkowych sytuacjach przejmują te obowiązki (wyjazd zagraniczny, urlop naukowy wykładowcy) i to za zgodą Rady Wydziału.

Na podstawie przysłanych wyników ankiet mogę stwierdzić, że studenci wysoko (w przedziale od 4,8 do 5 na maksymalną liczbę 5 punktów) oceniają moją działalność dydaktyczną. Podkreślają bardzo dobre przygotowanie merytoryczne, życzliwość i chęć udzielania pomocy w wyjaśnianiu trudnych zagadnień.

SPIS PUBLIKACJI NAUKOWYCH Z LISTY FILADELFIJSKIEJ

- [H1], H[2] ...- prace habilitacyjne
- IF dla prac z ostatnich pięciu lat zgodny z rokiem opublikowania
- IF₅ -średni IF z pięciu ostatnich lat
- TC-liczba cytowań danej pracy
- Udział własny (% i merytoryczny) podany jest dla prac opublikowanych po doktoracie i nie wchodzących w zakres prac rozprawy habilitacyjnej, a zgłoszonych jako główne osiągnięcie

Prace opublikowane przed doktoratem

1. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski
Structure of Putrescinium Dihydrogendiphosphate.
*Acta Cryst. C***46** (1990) 2158-2160.
IF₅ = 0.437
TC = 9
2. M. Gilski, **E. Bartoszak**, M. Jaskólski
Structure of 3'N4-Ethenocytidinium Dihydrogenphosphate.
*Acta Cryst. C***47** (1991) 1460-1463.
IF₅ = 0.437
TC = 2
3. **E. Bartoszak**, Z Dega-Szafran, M. Grunwald-Wyspiańska, M. Jaskólski, M. Szafran
X-Ray, FT-IR, ¹H and ¹³C NMR and PM3 Studies of (N-H...N)⁺ and (O-H...O)⁻
Intramolecular Hydrogen Bonds in a Complex of 1,8-Bis(dimethylamino)naphthalene
with Maleic Acid.
*J. Chem. Soc. Faraday Trans. B***89** (1993) 2085-2094.
IF = 1.69
TC = 40
4. **E. Bartoszak***, M. Jaskólski, T. Gustafsson, I. Olovsson, E. Grech
Structure of Thiocyanate Salt of 1,8-bis(Dimethylamino)naphthalene (DMANH⁺
SCN⁻) at 188 and 290K.
*Acta Cryst. B***50** (1994) 358-363.
IF₅ = 2.004
TC = 33
* Autor korespondencyjny
5. B. Golankiewicz, P. Januszczyk, J. Zeidler, M. Popenda, **E. Bartoszak**, Z.
Kosturkiewicz
The Route from 4-Oxo to 4-Amino-imidazo[1,5-a]-1,3,5-triazines and the
Tautomerism of 4-Oxo, 2-Thioxo and 4-Oxo-2-thioxo Derivatives. A ¹H and ¹³C
NMR and X-Ray Crystallographic Study.
J. Chem. Research, (1994) 0644-0671.
IF = 0.504
TC = 1
6. **E. Bartoszak**, Z Dega-Szafran, M. Jaskólski, M. Szafran

Autoreferat

X-Ray, FT-IR, ^1H and ^{13}C NMR, PM3 and AM1 Studies of $(\text{N-H}\dots\text{N})^+$ and $(\text{O-H}\cdot\text{O})^-$ Intramolecular Hydrogen Bonds in a Complex of 1,8-Diaminonaphthalene with Maleic Acid: Proton Cavity and Basicity of Proton Sponges.

J. Chem. Soc. Faraday Trans. **91** (1995) 87-92.

IF = 1.77

TC = 13

Prace opublikowane po doktoracie

7. **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, B. Brzezinski,
Crystal chemistry of protonated 1,2-bis(di-R-aminomethyl)benzenes.
Part I: 1,2-bis(dimethylaminomethyl)benzene perchlorate,
J. Mol. Struct. **446** (1998) 229-234.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 60%

IF₅ = 1.611

TC = 9

Mój udział w publikacji [7] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy Cambridge Structural Database (CSD) oraz na przygotowaniu manuskryptu.

8. **E. Bartoszak-Adamska***, E. Grech and M. Jaskólski,
X-ray, IR and ^1H NMR Studies of 1:1 Adduct of 1,8-Bis(Dimethylamino)naphthalene (DMAN) and 1,1-Cyclobutanedicarboxylic Acid (CBDC),
Pol. J. Chem. **72** (1998) 347-354.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 60%

* Autor korespondencyjny

IF₅ = 0.380

TC = 4

Mój udział w publikacji [8] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, na przygotowaniu manuskryptu oraz na prowadzeniu korespondencji z redaktorem.

9. **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, B. Brzezinski,.
Crystal chemistry of protonated 1,2-bis(di-R-aminomethyl)benzenes.
Part II: 1,2-bis(dimethylaminomethyl)benzene nitrate,
J. Mol. Struct. **448** (1998) 57-62.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 60%

IF₅ = 1.611

TC = 8

Mój udział w publikacji [9] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy Cambridge Structural Database (CSD) oraz na przygotowaniu manuskryptu.

10. **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, B. Brzezinski,

Autoreferat

Crystal chemistry of protonated 1,2-bis(di-R-aminomethyl)benzenes.

Part III: 1,2-bis(diethylaminomethyl)benzene perchlorate,

J. Mol. Struct. **475** (1999) 167-173

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 60%

IF₅ = 1.611

TC = 7

Mój udział w publikacji [10] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy Cambridge Structural Database (CSD) oraz na przygotowaniu manuskryptu.

11. **E. Bartoszak-Adamska***, M. Figlerowicz, M. Wiewiórowski, T. Gustafsson, I. Olovsson and M. Jaskólski,

The Influence of (O,N)-Deuteration on the Crystal and Molecular Structure, Thermal Stability and Spectroscopic Properties of 1,3-Propanediammonium Hydrogenphosphate Monohydrate,

Pol. J. Chem. **74** (2000) 393-408.

Udział własny: część krystalograficzna: **60%**

W odniesieniu do całości pracy: 40%

* Autor korespondencyjny

IF₅ = 0.380

TC = 0

Mój udział w publikacji [11] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz na prowadzeniu korespondencji z redaktorem.

12. [H1] **E. Bartoszak-Adamska**, G. Wojciechowski, M. Jaskólski, B. Brzezinski, Cooperative intramolecular hydrogen bonds in the structure of 5,5'-dibromo-3-diethylaminomethyl-2,2'-biphenol,

J. Mol. Struct. **525** (2000) 253-259.

IF₅ = 1.661

TC = 10

13. [H2] **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, G. Wojciechowski and B. Brzezinski Crystal and molecular structure of a complex formed between hydrochloride of 7-methyl-1,5,7-triazabicyclo [4.4.0]dec-5-ene and 5,5'-dibromo-2,2'-biphenol,

J. Mol. Struct. **595** (2001) 21-28.

IF₅ = 1.661

TC = 10

14. **E. Bartoszak-Adamska**, R. Bregier-Jarzebowska, L. Łomozik

Crystal and molecular structures of cadmium (II) nitrate complexes with triamines: 1,5-diamino-3-azapentane, 1,6-diamino-3-azahexane and 1,7-diamino-4-azaheptane, *Polyhedron* **21** (2002) 739-744.

Udział własny: część krystalograficzna: **100%**

W odniesieniu do całości pracy: 40%

IF₅ = 2.118

TC = 10

Autoreferat

Mój udział w publikacji [14] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz na zdeponowaniu danych strukturalnych dla trzech badanych kompleksów w bazie CCDC.

15. G.M. Zatorska, G.S. Dmytriv, V.V. Pavlyuk, **E. Bartoszak-Adamska** and M. Jaskólski,
Crystal structure of the new intermetallic compound $Zr_{2-x}Li_{x+y}Si_{1-y}$ ($x=0.17$, $y=0.12$)
and its relation with the disilicide $ZrSi_2$
J. Alloy Compd. **346** (2002) 154-157.

Udział własny: część krystalograficzna: **20%**
W odniesieniu do całości pracy: 20%

$IF_5 = 2.104$

TC = 3

Mój udział w publikacji [H14] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej rentgenowskiej analizy strukturalnej

16. [H3] **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Przedwojska and M. Jaskólski
Crystal and Molecular Structure of 1:1 Complex of *N*-Methylmorpholine Betaine with
Salicylic Acid,
Pol. J. Chem., **77** (2003) 1711-1722.
 $IF_5 = 0.380$
TC = 6

17. [H4] J. Wójcik, K. Kamińska-Trela, M. Pecul, **E. Bartoszak-Adamska**, S.I. Vdovienko and I.I. Gerus,
Improper Hydrogen C-H...O Bonds Cause Self-Association of α,β -Enaminoketones
Containing Fluorosubstituted Alkyl Groups,
ChemPhysChem **5** (2004) 209-215.
 $IF_5 = 3.553$
TC = 10

18. [H5] **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, H. Urjasz, B. Brzezinski,
Crystal chemistry of protonated 1,2-bis(di-R-aminomethyl)benzenes.
Part VII: 1,2-bis(dipropylaminomethyl)benzene perchlorate,
J. Mol. Struct. **738** (2005) 271-274.
 $IF_5 = 1.611$
TC = 1

19. [H6] Szafran, B. Nowak-Wydra, M. Jaskólski, **E. Bartoszak-Adamska**, A. Szwajca,
Z. Dega-Szafran.
Structures of pyrido[1,2a]pyrazinium and pyrido[1,2c][1,4]oxazonium bromides
studied by 1H , ^{13}C , ^{15}N NMR, X-ray and DFT methods.
J. Mol. Struct. **743** (2005) 7-20.
 $IF_5 = 1.611$
TC = 6

20. [H7] J. Gajda, J. Pacholczyk, A. Bujacz, **E. Bartoszak-Adamska**, G. Bujacz, W. Ciesielski and M.J. Potrzebowski,
Structure and Dynamics of L-Selenomethionine in the Solid State

Autoreferat

J. Phys. Chem. B **110** (2006) 25692-25701.

IF₅ = 4.061

TC = 4

21. [H8] M. Szafran, A. Komasa, **E. Bartoszak-Adamska**

Crystal and molecular structure of 4-carboxypiperidinium chloride
(4-piperidinecarboxylic acid hydrochloride)

J. Mol. Struct. **827** (2007) 101-107.

IF = 1.486

TC = 30

22. [H9] M. Szafran, I. Kowalczyk, **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, B. Nowak-Wydra
Structure of 1-methyl-2-oxo-pyrido[2,1b][3,4]dihydropyrimidinium bromide studied
by X-ray diffraction, FTIR and NMR spectroscopy and DFT calculations
J. Mol. Struct. **843** (2007) 107-115.

IF = 1.486

TC = 3

23. [H10] M. Szafran, **E. Bartoszak-Adamska**, J. Koput, Z. Dega-Szafran
Structure of 1-methylpyridinium-4-carboxylate monohydrate studied by
X-ray, FT-IR, Raman, NMR and ab initio methods.

J. Mol. Struct. **844 – 845** (2007) 140-156.

IF = 1.486

TC = 11

24. [H11] **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Krociak, M. Jaskólski, M. Szafran
Hydrogen bonds in 1:1 complex of piperidine-3-carboxylic acid with salicylic acid.
J. Mol. Struct. **920** (2009) 68-74.

IF = 1.551

TC = 3

25. [H12] **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Jaskólski, M. Szafran
Structural, spectroscopic and theoretical studies of a very short OHO hydrogen bond
in bis(4-(N-methylpiperidinium)-butyrate) hydrobromide.

J. Phys. Org. Chem. **22** (2009) 356-361.

IF = 1.498

TC = 4

26. I. Kowalczyk, **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, Z. Dega-Szafran, M. Szafran,
Structure of 1H-2-oxo-2,3-dihydroimidazo[1,2-a]pyridinium perchlorate studied by X-
ray diffraction, DFT calculations and by FTIR and NMR spectroscopy
J. Mol. Struct. **976** (2010) 119-128.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**
W odniesieniu do całości pracy: 30%

IF = 1.599

TC = 4

Mój udział w publikacji [26] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z

Autoreferat

wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

27. [H13] **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Jaskólski, M. Szafran
Diastereomeric Complex of (R/S)-piperidine-3-carboxylic acid with (2R,3R)-tartaric acid. Structural, spectroscopic and structural studies.
J. Mol. Struct. **999** (2011) 98-105.
IF = 1.634
TC = 0
28. [H14] T. Ostrowski, P. Januszczyk, M. Cieślak, J. Kaźmierczak-Barańska, B. Nawrot, **E. Bartoszak-Adamska**, J. Zeidler.
5-Ethynyl-1-β-D-ribofuranosyl-1H-[1,2,3]triazole-4-carboxylic acid amide (ETCAR) and its analogues: Synthesis and cytotoxic properties.
Bioorganic and Medicinal Chemistry **19** (2011) 4386-4398.
IF = 2.921
TC = 0
29. L. Zaprutko, J. Żwawiak, E. Augustynowicz-Kopeć, Zofia Zwolska, **E. Bartoszak-Adamska**, W. Nowicki
Synthesis, Structure and Biological Evaluation of Novel Bicyclic Nitroimidazole Derivatives.
Arch. Pharm. **345** (2012) 463-467.
Udział własny: część krystalograficzna: **80%**
W odniesieniu do całości pracy: 20%
- IF = 1.708
TC = 0
Mój udział w publikacji [29] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy Cambridge Structural Database (CSD), przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

Publikacje poza listą filadelfijską

30. R. Bregier-Jarzębowska, **E. Bartoszak-Adamska**, R. Jastrząb, L. Lomozik
Crystal structure of cadmium II nitrate complex with 1,5-diamino-3-azapentane.
Ann. Pol. Chem. Soc. (2001) 155-156
Udział własny: część krystalograficzna: **100%**
W odniesieniu do całości pracy: 10%
Mój udział w publikacji [30] polegał na wykonaniu rentgenowskiej analizy strukturalnej.
31. G.M. Zatorska, G.S. Dmytriv, V.V. Pavlyuk, V. M. Davydov, **E. Bartoszak-Adamska** and M. Jaskólski
Crystallographic investigations of the ternary compounds in the Zr-Li-Si system,
Journal of Light Metals **2** (2002) 77-80.
Udział własny: część krystalograficzna: **20%**
W odniesieniu do całości pracy: 10%
Mój udział w publikacji [31] polegał na wykonaniu rentgenowskiej analizy strukturalnej.

Autoreferat

32. Komasa, **E. Bartoszak-Adamska**, M. Szafran,
Crystal and molecular structure of piperidine-4-carboxylic acid hydrochloride- X-ray,
FTIR, NMR, DFT.
Ann. Pol. Chem. Soc. (2005), I, 182-186.

Udział własny: część krystalograficzna: **100%**

W odniesieniu do całości pracy: 20%

Mój udział w publikacji [32] polegał na wykonaniu rentgenowskiej analizy strukturalnej.

KOMUNIKATY NAUKOWE

Postery, komunikaty ustne, wykłady prezentowane przed doktoratem

1. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski (1987) Crystal and Molecular Structure of 1,3-Diaminopropane Dihydrochloride. XXIX Konwersatorium Krystalograficzne PAN, Jaszowiec, 21-23 IX (poster)
2. M. Figlerowicz, M. Alejska, M. D. Bratek-Wiewiórowska, **E. Bartoszak**, M. Jaskólski (1988), Wpływ protonowanych diamin alifatycznych na stopień i charakter uwodnienia ich monowodorofosforanowych soli. Zjazd Naukowy PTCh i SIT-PCh, Łódź, 14-17 IX (poster)
3. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski (1988) Oddziaływania dwuprotonowanych diamin z przeciwjonami w świetle badań rentgenowskich. IV Środowiskowa Konferencja Chemików, Poznań, 25-26 X (poster)
4. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski (1988) Wiązania wodorowe w kryształach pirofosforanu putrescyny i difosforanu 1,3-diaminopropanu. XXX Konwersatorium Krystalograficzne PAN, Wrocław –Lubawka, 27-29 VI (poster)
5. M. Wiewiórowski, K. Kulińska, A. Perkowska, N. Malinowska, M. D. Bratek-Wiewiórowska, **E. Bartoszak**, M. Jaskólski (1989) The Nature of Drastic Differences in the Recognition of Protonated Cytidine and 2'-Deoxycytidine Cations by their Parent Nucleosides in the Aqueous Solutions and Solid Phase of their Salts. IX International Workshop "Horizons in Hydrogen Bond Research, Zeist, The Netherlands, 10-15 IX (poster)
6. K. Kulińska, J. Szarzyńska, M. Alejska, M. D. Bratek-Wiewiórowska, M. Wiewiórowski, **E. Bartoszak**, M. Jaskólski (1989) The influence of 2' OH group on the association abilities of Cytidine (Cyd), 2' deoxycytidine (dCyd) and their protonated cations from X-ray data and FTIR spectroscopy. VII International Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyna, Poland, 14-17 VIII (poster)
7. **E. Bartoszak** (1989) Crystal and Molecular Structure of Adenine Dihydrogenphosphate. VII International Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań- Rydzyna, Poland, 14-17 VIII (poster)
8. **E. Bartoszak**, E. Ciszak, Z. Kosturkiewicz (1990) Structure of Derivatives of 1,3,5-Triazine. XV Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography, Bordeaux, France 19-28 July (poster)

9. **E. Bartoszak**, T. Gustafsson, I. Olovsson (1990) Struktura rodanku 1,8-bis(dimetyloamino)naftalenu w temperaturach 188 i 290 K. XXXII Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław, 28-32 VI (poster)
10. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski, T. Gustafsson, I. Olovsson (1990) Struktura jednowodnego monowodorofosforanu 1,3-propanodiamoniowego (290K) i jego deuterowanej pochodnej (25K i 290K). XXXII Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław, 28-29 VI (poster)
11. **E. Bartoszak**, **E. Ciszak**, Z. Kosturkiewicz (1990) Hydrogen Bonds in Derivatives of 1,3,5-Triazine. VI Polish-Soviet Seminar on Hydrogen Bonding, Poznań, Poland, 2-6 May (poster)
12. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski, T. Gustafsson, I. Olovsson (1990) Short N-H...N Hydrogen Bond in the Structure of 1,8-bis(dimethylammino)naphthalene Rhodolate. X-ray Low Temperature Investigations. VI Polish-Soviet Seminar on Hydrogen Bonding, Poznań, Poland, 2-6 May (poster)
13. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski, I. Olovsson, E. Grech (1991) Gąbki protonowe. XXXIII Polish Crystallographic Meeting, Wrocław, Poland, 27-28 VI (oral presentation)
14. **E. Bartoszak** (1991) Proton Sponges, Uppsala University, Sweden, 27th September (lecture)
15. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski, B. Brzezinski, E. Grech (1992) The role of the steric effects in two classes of proton sponges, XXXIV Polish Crystallographic Meeting, Wrocław, Poland, 25-26 June (oral presentation)
16. **E. Bartoszak**, M. Jaskólski, B. Brzezinski, E. Grech (1992) The role of the steric effects in two classes of proton sponges. VIII International Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyna, Poland, 26-30 July (oral presentation)
17. **E. Bartoszak-Adamska** (1992) Wiązania wodorowe N-H...N w gąbkach protonowych, wykład na zaproszenie Politechniki Szczecińskiej wygłoszony w ramach sekcji PTCh, 24 June (lecture)
18. **E. Bartoszak-Adamska** (1994) Gąbki protonowe w ujęciu ogólnym. Sesja pt. „Inżynieria krystaliczna nukleozydów i wybrane zagadnienia dotyczące wiązań wodorowych”, Poznań, Poland, 15-th April (oral presentation)
19. **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Grunwald-Wyspiańska, M. Jaskólski, B. Nowak-Wydra, M. Szafran (1994) Wiązania wodorowe w maleinianie 1,8-diaminonaftalenu. V Środowiskowa Konferencja Naukowa Chemików, Poznań, Poland, 9-10 June (poster)
20. **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski (1994) Structural Differences between the DANH⁺ and DMANH⁺ Cations in Their Hydrogen Maleate Salts. IX Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyna, Poland, 23-27 August (poster)

21. **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski (1997) $H_5P_2O_8^-$ Centrosymmetric Dimers in the Crystal Structure of $EDA \cdot 3H_3PO_4$: Low Temperature X-ray and Neutron Diffraction Studies, 10th International Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyń, Poland, 17-21 August 1997 (poster)
22. **E. Bartoszak-Adamska**, E. Grech, M. Jaskólski (1997) Crystallographic and Spectroscopic Studies of 1:1 Adduct of 1,8-bis(dimethylamino)naphthalene (DMAN) and 1,1-cyclobutanedicarboxylic Acid (CBDC), XII Conference-Workshop "Horizons in Hydrogen Bond Research", Styria, Austria, 21-16 September (poster)
23. **E. Bartoszak-Adamska**, M. Figlerowicz, M. Wiewiórowski, T. Gustafsson, I. Olovsson, M. Jaskólski (1998) Structural Studies of a model polyamine...phosphate system. International Conference: Nucleic Acids and their Constituents, Chemical Evolution underlying Biological Evolution, Poznań, Poland, 10-13 May. Abstracts, p.64 (poster)
24. **E. Bartoszak-Adamska**, B. Brzezinski, M. Jaskólski (1998) Badania strukturalne soli diamin typu 1,2-bis(dialkiloaminometylo)benzenu, Krysztale Organiczne, Poznań, Poland, 10-11 September.(poster)
25. **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski (2000) Kolektywne wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe w kryształach dibromowej pochodnej zasady Mannicha, 42-gie Konwersatorium Krystalograficzne, Wrocław, Poland, 28-29 June (poster)
26. **E. Bartoszak-Adamska**, J. Wójcik and S. Vdovenko (2001) An example of a strong C-H...O hydrogen bond, 11th International Symposium on Organic Crystal Chemistry, Poznań-Rydzyń, 20-24 August, Collected Abstracts, p.56 (poster and short oral presentation)
27. G. Dmitriv, V. Pavlyuk, **E. Bartoszak-Adamska** and M. Jaskólski (2001) Crystal Structure of the New Intermetallic Compound $Zr_{2-x}Li_{x+y}Si_{1-y}$ ($x=0.17$, $y=0.12$), 20th European Crystallographic Meeting, 25- 31 August, Kraków, Book of Abstracts, p. 346 (poster)
28. R. Bregier, Jastrzab, Lomozik and **E. Bartoszak-Adamska** (2003) "Struktura krystaliczna kompleksu azotanu kadmu (II) z 2,5-diamino-3-azapentanem", 15 września 2003, Katowice (poster)
29. A. Szwejca, B. Nowak-Wydra, **E. Bartoszak-Adamska** and M. Szafran (2004), Structures and NMR Spectra of Pyrido[1,2a]Pyrazinium and Pyrido[1,2a]dihydroazinium Bromides, XXVII European Conference on Molecular Spectroscopy, 5-10 September, Kraków, Book of abstracts, p. 200 (oral presentation)
30. J. Wójcik, K. Kamińska-Trela, M. Pecul, **E. Bartoszak-Adamska**, S.I. Vdovenko and I.I. Gerus (2004) C-H...O bonds cause self-associations of α,β -enaminoketones containing fluorosubstituted alkyl group, 14th European Symposium on Fluorine Chemistry, 11-16 July, Poznań, Abstracts, p. 83 (oral presentation)

Autoreferat

31. **E. Bartoszak-Adamska** and M. Jaskólski (2004) A 1:1 complex of N-methylmorpholine betaine with salicylic acid, 22nd European Crystallographic Meeting, 25-31 August, Budapest, *Acta Cryst.* (2004) **A60** s298 (poster)
32. **Komasa, E. Bartoszak-Adamska, M. Szafran** (2005) Struktura chlorowodoru kwasu piperydino-4-karboksylowego- X-ray, FTIR, NMR DFT, XLVIII Zjazd Naukowy PTCh i SITPCh, 18-22 września 2005, Poznań, Materiały Zjazdowe, Sekcja 2. Chemia Organiczna i Bioorganiczna, S2-P118 (poster)
33. **E. Bartoszak-Adamska, A. Bujacz, J. Gajda, J. Pacholczyk, M.J. Potrzebowski** (2005) Struktura i przemiany fazowe selenometioniny w ciele stałym z wykorzystaniem rentgenografii i spektroskopii NMR, XLVIII Zjazd Naukowy PTCh i SITPCh, 18-22 września 2005, Poznań, Materiały Zjazdowe, Sekcja 7. Chemia Strukturalna, S7-P14 (poster)
34. **E. Bartoszak-Adamska, B. Brzezinski, H. Urjasz, M. Jaskólski** (2005) Proton Sponges of 1,2-bis(di-*R*-aminomethyl)benzene Type, XX Congress of the International Union of Crystallography, Congress and General Assembly, 23-31 August 2005, Florence, Book of Abstracts, P.08.13.5, *Acta Cryst.* **A61** (2005) C339 (poster)
35. **M. Jaskólski, E. Bartoszak-Adamska** (2005) Real versus Virtual aids in Teaching Crystallography, XX Congress of the International Union of Crystallography, Congress and General Assembly, 23-31 August 2005, Florence, Book of Abstracts, Microsymposia, **MS96.30.3**, *Acta Cryst.* **A61** (2005) C121 (oral presentation)
36. **Kowalczyk, M. Szafran, E. Bartoszak-Adamska** (2006) Badania X-ray FTIR, NMR i DFT bromku 1-metylo-2-oxo-pyrido[2,1b][3,4]dihydropirymidyniowego, VIII Środowiskowa Konferencja Naukowa Chemików, Poznań, 5-7 czerwca 2006, Chemia w zrównoważonym rozwoju, str. 62 (poster)
37. **E. Bartoszak-Adamska, M. Jaskólski, B. Golankiewicz** (2006) Comparison of C-tritylation products of two tricyclic analogs of acyclovir, 23rd European Crystallographic Meeting, ECM23, 7-11 August, Leuven, Belgium, *Acta Cryst.* (2006). **A62**, s. 291 (poster)
38. **A. Vij, R. Linantonio, F. Meyer, P. Metrangolo, G. Resnati, T. Pilati, E. Bartoszak-Adamska, M. Jaskólski** (2006) 1,2-Dihalotetrafluoroethane/benzene as versatile synthons in supramolecular "Legoland" architecture. 232nd ACS National Meeting, San Francisco, CA, United States, Sept. 10-14, 2006, FLUO-006. Publisher: American Chemical Society, Washington, D.C. CODEN: 69IHRD Conference; Meeting Abstract; Computer Optical Disk. AN 2006:859660 CAPLUS
39. **M. Szafran, Z. Dega-Szafran, J. Koput, A. Katrusiak, E. Bartoszak-Adamska** (2006) Structural, Spectroscopic and ab initio Studies of N-methyl-pyridine-carboxylate Inner Salts and Their Complexes with Mineral Acids. 18th Conference on Physical Organic Chemistry, Poland, Warsaw, 20-25 VIII, 2006 Book of Abstracts p. 36 (oral communication)

40. M. Szafran, I. Kowalczyk, A. Katrusiak, **E. Bartoszak-Adamska** (2007) Prototropic Equilibria of 1H-2-Oxo-pyrido[2,1b][3,4]dihydropyrimidinium chloride and 3-(2-aminopyrimidinium)-propionate, XVII International Conference „Horizons in Hydrogen Bond Research”, September 1-8, Saint-Petersburg, Russia, Book of Abstracts, O22 p. 79 (oral presentation).
41. M. Szafran, I. Kowalczyk, **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran (2008) Structural studies of 1-*H*-2-oxo-2,3-dihydroimidazo[1,2-*a*]pyridinium chloride, bromide and perchlorate by X-ray, DFT, FTIR and NMR. Central European School on Physical Organic Chemistry. Structure and properties of organic molecules. Karpacz, 8-12 June 2008, Book of Abstracts, Lectures, p.6 (lecture)
42. **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Jaskólski, M. Krociak, M. Szafran (2008) Wiązanie wodorowe w kompleksie kwasu nipecotynowego z kwasem salicylowym. 51 Zjazd PTChem i SITPChem, 7-11 września 2008, Opole, Księga Streszczeń, s. 179 (poster)
43. Z. Dega-Szafran, **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, M. Szafran (2008) Short OHO hydrogen bond in bis(4-(N-methylpiperidinium)butyrate)hydrobromide studied by X-ray diffraction, FTIR, NMR and DFT methods. 19th IUPAC Physical Organic Chemistry Conference - Santiago de Compostella, Spain, 13-18 June 2008 (poster)
44. M. Szafran, I. Kowalczyk, **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran (2008) X-ray diffraction, FTIR and NMR Spectra, and DFT Calculations of 2-Aminopyridine Betaine and 1-*H*-2-oxo-2,3-dihydroimidazo[1,2-*a*]pyridinium Chloride, Bromide and Perchlorate. XXIX European Congress on Molecular Spectroscopy -EUCMOS 2008, Opatija, Croatia, August 31st – September 5th, Abstracts, O1-16, p.34 (oral communication)
45. Z. Dega-Szafran, M. Szafran, **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski (2010), NMR Spectra of The 2:2 Complex of (+/-)-Nipecotic Acid with L(+)-Tartaric Acid. VI Symposium NMR in Chemistry, Physics and Biology, 22-24.09.2010, Warszawa
46. **E. Bartoszak-Adamska**, W. Nowicki, J. Żwawiak, L. Zaprutko (2011), Krysztal molekularny 3-hydroxy-8-nitro-1-fenylimidazo[5,1-*b*]-1,4,5,6-tetrahydropyrimidyny. 53 Konwersatorium Krystalograficzne, 30.VI-2.VII 2011, Wrocław, Streszczenia Komunikatów, A-83, p.168 (poster)

15A. WYKŁADY I REFERATY WYGŁOSZONE W MACIERZYSTEJ JEDNOSTCE:

- Wygłoszenie referatu pt. *Wiązanie wodorowe jako czynnik determinujący konformację i aranżację cząsteczek w kryształach organicznych*.
na mikrosymposium wydziałowym *Adiunkci Zakładu Krystalografii*, marzec 2005

15B. WYKŁADY, SEMINARIA WYGŁOSZONE NA INNYCH UCZELNIACH
I W OŚRODKACH NAUKOWYCH

- *Proton Sponges*, Uppsala University, Szwecja, wrzesień 1990
- *Wiązania wodorowe N-H...N w gąbkach protonowych*, wykład na zaproszenie Politechniki Szczecińskiej wygłoszony w ramach sekcji PTCh, czerwiec 1992
- *Badania neutronograficzne i rentgenograficzne soli diamin alifatycznych i aromatycznych*, Uniwersytet Wrocławski, marzec 1996
- Wygłoszenie wykładu i referatu w Instytucie Chemii Bioorganicznej Polskiej Akademii Nauk:
 - *Crystallographic puzzles with salicylates and B-DNA*, styczeń 2010
 - *Crystal structure of a novel imidazole derivative*, 14. marca 2012

16. SZKOLENIA, WARSZTATY, INNE

- Udział w szkoleniu poświęconym obsłudze dyfraktometru proszkowego firmy Bruker, wrzesień 2006.
- Udział w szkoleniach zorganizowanych przez Oxford Diffraction (2006 i 2008) oraz Agilent Technologies dla użytkowników dyfraktometrów SuperNova i Xcalibur (marzec-kwiecień 2010, wrzesień 2011)
- Udział w konferencji *NEW FRONTIERS IN STRUCTURAL BIOLOGY*
Poznań, January 19-20, 2012
- Udział w warsztatach Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego pt. *Gęstość elektronowa*, Wrocław, lipiec 2012

17A. WYBRANE PRACE ORYGINALNE STANOWIĄCE GŁÓWNE OSIĄGNIĘCIE

- H1. **E. Bartoszak-Adamska**, G. Wojciechowski, M. Jaskólski, B. Brzezinski,
Cooperative intramolecular hydrogen bonds in the structure of 5,5'-dibromo-3-diethylaminomethyl-2,2'-biphenol,
J. Mol. Struct. **525** (2000) 253-259.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**
W odniesieniu do całości pracy: 45%

IF₅ = 1.611
TC = 10

Mój udział w powyższej publikacji polegał na wykonaniu badań krystalograficznych tytułowego związku oraz analizie i dyskusji wyników, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy Cambridge Structural Database (CSD), przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

- H2. **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, G. Wojciechowski and B. Brzezinski
Crystal and molecular structure of a complex formed between hydrochloride of 7-methyl-1,5,7-triazabicyclo [4.4.0]dec-5-ene and 5,5'-dibromo-2,2'-biphenol,
J. Mol. Struct. **595** (2001) 21-28.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**
W odniesieniu do całości pracy: 45%

IF₅ = 1.611
TC = 10

Mój udział w publikacji [H2] polegał na wykonaniu niskotemperaturowych badań rentgenograficznych tytułowego kompleksu molekularnego oraz analizie i dyskusji wyników, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

- H3. **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Przedwojska and M. Jaskólski
Crystal and Molecular Structure of 1:1 Complex of *N*-Methylmorpholine Betaine with Salicylic Acid,
Pol. J. Chem. **77** (2003) 1711-1722.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**
W odniesieniu do całości pracy: 65%

IF₅ = 0.380
TC = 6

Podjęłam się wykonania badań krystalograficznych kryształu, dla którego prowadzone wcześniej pomiary natężeń refleksów przez doświadczonego krystalografa nie pozwalały nawet na określenie grupy przestrzennej. Mój udział w pracy [H3] polegał na wykonaniu wstępnego i właściwego pomiaru dyfrakcyjnego oraz na szczegółowej analizie sieci odwrotnej w celu wykluczenia przypadku zbliżniaczenia kryształu a następnie na wyznaczeniu właściwej grupy przestrzennej i korekcji natężeń zarejestrowanych refleksów oraz na wykonaniu dalszych etapów badań rentgenowskich. Przeprowadziłam analizę i dyskusję wyników, opracowałam manuskrypt i zdeponowałam dane krystalograficzne w bazie CCDC.

- H4. J. Wójcik, K. Kamińska-Trela, M. Pecul, **E. Bartoszak-Adamska**, S.I. Vdovienko and I.I. Gerus,
Improper Hydrogen C-H...O Bonds Cause Self-Association of α,β -Enaminoketones Containing Fluorosubstituted Alkyl Groups,
ChemPhysChem **5** (2004) 209-215.

Autoreferat

Udział własny: część krystalograficzna: **100%**

W odniesieniu do całości pracy: 20%

$$IF_5 = 3.553$$

$$TC = 10$$

W ramach współpracy naukowej zwrócono się do mnie do mnie, jako do specjalisty zajmującego się zagadnieniem wiązań wodorowych, w celu wykonania badań krystalograficznych bardzo ciekawego kryształu 4-N,N-dimetyloamino-1,1,1-trifluoro-3-buten-2-onu, którego struktury nie udało się wcześniej określić. Mój udział w publikacji [H4] polegał na wykonaniu pomiarów rentgenowskich z zastosowaniem technik krikrystalograficznych, na rozwiązaniu i udokładnieniu struktury, analizie i dyskusji wyników oraz przygotowaniu danych krystalograficznych do zdeponowania w bazie CCDC.

H5. M. Szafran, B. Nowak-Wydra, M. Jaskólski, **E. Bartoszek-Adamska**, A. Szwejca, Z. Dega-Szafran.

Structures of pyrido[1,2a]pyrazinium and pyrido[1,2c][1,4]oxazonium bromides studied by ^1H , ^{13}C , ^{15}N NMR, X-ray and DFT methods.

J. Mol. Struct. **743** (2005) 7-20.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 40%

$$IF_5 = 1.611$$

$$TC = 1$$

Mój udział w publikacji [H5] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

H6. **E. Bartoszek-Adamska**, M. Jaskólski, H. Urjasz, B. Brzezinski,
Crystal chemistry of protonated 1,2-bis(di-R-aminomethyl)benzenes.

Part VII: 1,2-bis(dipropylaminomethyl)benzene perchlorate,

J. Mol. Struct. **738** (2005) 271-274.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 45%

$$IF_5 = 1.611$$

$$TC = 6$$

Mój udział w publikacji [H6] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

H7. J. Gajda, J. Pacholczyk, A. Bujacz, **E. Bartoszek-Adamska**,
G. Bujacz, W. Ciesielski and M.J. Potrzebowski,
Structure and Dynamics of L-Selenomethionine in the Solid State
J. Phys. Chem. B **110** (2006) 25692-25701.

Udział własny: część krystalograficzna: **45%**

W odniesieniu do całości pracy: 22%

$$IF_5 = 4.061$$

$$TC = 4$$

W ramach współpracy naukowej z IBT Politechniki Łódzkiej otrzymałam wyhodowany przez dr Annę Bujacz kryształ L-selenometyoniny w celu przeprowadzenia niskotemperaturowych badań krystalograficznych. Dane eksperymentalne uzyskane z pomiaru dyfraktometrycznego

Autoreferat

przeprowadzonego w warunkach standardowych na Politechnice Łódzkiej przez dr Bujacz nie pozwalały na uzyskanie satysfakcjonujących wyników udokładniania struktury ($R_1 > 10\%$).

Mój udział w publikacji [H7] polegał na wykonaniu niskotemperaturowych pomiarów dyfraktometrycznych, wykonaniu korekcy danych z uwzględnieniem poprawki na absorpcję, rozwiązaniu i udokładnieniu struktury, analizie i dyskusji wyników oraz przygotowaniu manuskryptu.

H8. M. Szafran, A. Komasa, **E. Bartoszak-Adamska**

Crystal and molecular structure of 4-carboxypiperidinium chloride
(4-piperidinecarboxylic acid hydrochloride)

J. Mol. Struct. **827** (2007) 101-107.

Udział własny: część krystalograficzna: **100%**

W odniesieniu do całości pracy: 30%

IF = 1.486

TC = 30

Mój udział w publikacji [H8] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

H9. M. Szafran, I. Kowalczyk, **E. Bartoszak-Adamska**, M. Jaskólski, B. Nowak-Wydra

Structure of 1-methyl-2-oxo-pyrido[2,1b][3,4]dihydropyrimidinium bromide studied
by X-ray diffraction, FTIR and NMR spectroscopy and DFT calculations

J. Mol. Struct. **843** (2007) 107-115

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 20%

IF = 1.486

TC = 3

W publikacji [H9] mój udział polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

H10. M. Szafran, **E. Bartoszak-Adamska**, J. Koput, Z. Dega-Szafran

Structure of 1-methylpyridinium-4-carboxylate monohydrate studied by
X-ray, FT-IR, Ramam, NMR and ab initio methods.

J. Mol. Struct. **844 – 845** (2007) 140-156.

Udział własny: część krystalograficzna: **100%**

W odniesieniu do całości pracy: 55%

IF = 1.486

TC = 11

Mój udział w publikacji [H10] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

H11. **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Krociak, M. Jaskólski, M. Szafran,

Hydrogen bonds in 1:1 complex of piperidine-3-carboxylic acid with salicylic acid.

J. Mol. Struct. **920** (2009) 68-74.

Udział własny: część krystalograficzna: **70%**

W odniesieniu do całości pracy: 45%

IF = 1.551

TC = 3

Mój udział w publikacji [H11] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

H12. **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Jaskólski, M. Szafran

Structural, spectroscopic and theoretical studies of a very short OHO hydrogen bond in bis(4-(N-methylpiperidinium)-butyrate) hydrobromide.

J. Phys. Org. Chem. **22** (2009) 356-361.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 55%

IF = 1.478

TC = 4

Mój udział w publikacji [H12] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

H13. **E. Bartoszak-Adamska**, Z. Dega-Szafran, M. Jaskólski, M. Szafran

Diastereomeric Complex of (R/S)-piperidine-3-carboxylic acid with (2R,3R)-tartaric acid. Structural, spectroscopic and computational studies.

J. Mol. Struct. **999** (2011) 98-105.

Udział własny: część krystalograficzna: **90%**

W odniesieniu do całości pracy: 55%

IF = 1.634

TC = 0

Mój udział w publikacji [H13] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

H14. T. Ostrowski, P. Januszczyk, M. Cieślak, J. Kaźmierczak-Barańska, B. Nawrot,

E. Bartoszak-Adamska, J. Zeidler.

5-Ethynyl-1-β-D-ribofuranosyl-1H-[1,2,3]triazole-4-carboxylic acid amide (ETCAR) and its analogues: Synthesis and cytotoxic properties.

Bioorganic and Medicinal Chemistry **19** (2011) 4386-4398.

Udział własny: część krystalograficzna: **100%**

W odniesieniu do całości pracy: 20%

IF = 2.921

TC = 0

Mój udział w publikacji [H14] polegał na wykonaniu części eksperymentalnej i obliczeniowej oraz analizie i dyskusji wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej, przygotowaniu części literaturowej z wykorzystaniem bazy CSD, przygotowaniu manuskryptu oraz zdeponowaniu danych krystalograficznych w bazie CCDC.

Sumaryczny *impact factor* IF dla prac **H1-H14** = **25.2**

Przedstawione prace są owocem współpracy ze specjalistami reprezentującymi różne metody i techniki badawcze z dziedziny chemii, biochemii i biofizyki. We wszystkich pracach, z wyjątkiem pracy **H7**, byłam główną lub jedyną osobą odpowiedzialną za koncepcję i realizację części krystalograficznej badań.

17B. OMÓWIENIE NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ ZAWARTYCH W PRACACH PRZEDSTAWIONYCH DO HABILITACJI

Przedstawiony cykl prac pt. „Wiązania wodorowe a konformacja i aranżacja cząsteczek w kryształach organicznych” obejmuje 14 publikacji, które są oznaczone symbolami [H1 – H14].

1. Wprowadzenie i cel badań naukowych

Przyjęcie przez cząsteczkę organiczną w fazie stałej danej konformacji jest często skorelowane z architekturą sieci krystalicznej oraz ma wpływ na własności fizyko-chemiczne substancji w fazie stałej. W kryształach obecność uprzywilejowanej konformacji jest uzależniona w głównej mierze od czynników energetycznych i sterycznych, przy spełnieniu zasady najgęstszej upakowania i wymogów symetrii [1, 2]

Celem naukowym mojej rozprawy jest badanie, na podstawie wybranej grupy związków organicznych, wpływu stosunkowo słabego czynnika elektronowego, jakim jest wiązanie wodorowe, na konformację i aranżację cząsteczek w kryształach.

Obiektem moich badań są cząsteczki, jony i jony obojętne, które charakteryzują się stosunkowo dużą swobodą konformacyjną. Reprezentują one szeroki wachlarz związków organicznych, które występują:

- (i) w kryształach molekularnych – pochodna 5,5'-dibromo-2,2'-bifenolu, enaminoketon, L-selenometionina, β -D-rybofuranozyd
- (ii) w jonowych kryształach organicznych – sole 5,5'-dibromo-2,2'-bifenolu, 1,2-bis(dipropilo-aminometylo)benzenu, sole betain zawierających układy cykliczne.

Wspólną cechą tych związków jest możliwość utworzenia wiązań wodorowych, które mogą stanowić istotny czynnik stabilizujący lub nawet determinujący daną konformację.

W ramach moich badań nawiązałam współpracę z grupami badawczymi na Wydziale Chemii UAM (prof. B. Brzezinski, prof. Z. Dega-Szafran, prof. M. Szafran), na Politechnice Łódzkiej (prof. M. Potrzebowski, prof. G. Bujacz), w Instytucie Chemii Bioorganicznej PAN w Poznaniu (prof. IChB J. Zeidler) oraz w Instytucie Biochemii i Biofizyki PAN w Warszawie (prof. J. Wójcik), które zajmują się syntezą organiczną i badaniami spektroskopowymi.

Strukturę atomową poszczególnych związków określiłam na podstawie badań rentgenograficznych z uwzględnieniem technik kriokrystalograficznych.

Rentgenografia monokryształów jest idealną metodą do badania konformacji cząsteczek w ciele stałym i służy poznaniu struktury analizowanej substancji w trzech wymiarach. Współczesna rentgenografia obok neutronografii należy również do cennych metod badawczych służących odkryciom różnorodnych typów wiązań wodorowych w kryształach, dzięki wysokiej klasy dyfraktometrom wyposażonym w przystawki niskotemperaturowe, które umożliwiają uzyskanie danych doświadczalnych charakteryzujących się wysoką rozdzielczością.

2. Wiązania wodorowe

Wiązanie wodorowe w światowej literaturze naukowej zajmuje znaczące miejsce i nadal jest przedmiotem intensywnych badań, mimo że od czasu kiedy pojawiły się pierwsze prace niemieckich chemików [3-4], minęło już ponad 100 lat. W minionym wieku skupiano się na badaniu natury tego oddziaływania chemicznego [5-17], które pod względem energetycznym zajmuje miejsce między wiązaniami kowalencyjnymi a oddziaływaniami van der Waalsa. Wiązanie wodorowe jest wystarczająco silne, aby stabilizować np. strukturę DNA i jednocześnie dużo słabsze od wiązań walencyjnych, dzięki czemu rozplatanie podwójnej helisy nie jest tak kosztownym energetycznie procesem.

Chemiczna klasyfikacja wiązań wodorowych, jaką zaproponowali Gastone Gilli i Paola Gilli w „*The Nature of the Hydrogen Bond. Outline of a Comprehensive Hydrogen Bond Theory*” [18] obejmuje dwie kategorie wiązań wodorowych. W pierwszej kategorii (I) rozpatrywane są wiązania wodorowe trójbondowe czteroelektronowe, w drugiej (II) trójbondowe dwuelektronowe.

W obrębie kategorii I wyróżnione zostały dwie klasy: pierwsza (1) z wiązaniami wodorowymi zawierającymi pierwiastki grup głównych oraz druga (2) z udziałem atomu metalu jako donora lub akceptora. W interesującej mnie klasie 1 wyróżnia się cztery grupy. Grupa 1.1 obejmuje konwencjonalne wiązania wodorowe $D-H\cdots A$, gdzie $D, A = N, O, S, F, Cl, Br$. W grupie 1.2 występują słabe donory wiązania wodorowego $WD-H\cdots A$, w którym $WD = C, P, Se, Si$. Z kolei grupa 1.3 charakteryzuje się słabymi akceptorami wiązania wodorowego $D-H\cdots WA$ [WA = występujące w związkach organicznych atomy $F, Cl, Br, S, Se, Te, P, As, Sb$ oraz $:C$]. Czwarta grupa 1.4 dotyczy wiązań wodorowych z udziałem układów π elektronowych ($D-H\cdots$ wiązanie π).

Elektroujemność donora i akceptora jest istotnym czynnikiem stanowiącym o sile wiązania wodorowego. Podział na grupy od 1.1 do 1.4 jest w istocie podziałem uwzględniającym spadek elektroujemności.

W ramach konwencjonalnych wiązań wodorowych (grupa 1.1) zostało wyodrębnionych sześć podgrup z charakterystycznymi chemicznymi motywami przewodnimi (*chemical leitmotifs*, CLs):

- CL1 – zwykłe wiązania wodorowe (ordinary hydrogen bond, OHB) o słabym elektrostatycznym charakterze oddziaływań,
- CL2 – silne wiązanie wodorowe wspomagane ładunkiem dodatnim i ujemnym (double charge – assisted H-bond, ($\pm$)CAHB),
- CL3 – silne wiązanie wodorowe wspomagane ładunkiem ujemnym (negative charge– assisted H-bond, (-)CAHB),
- CL4 – silne wiązanie wodorowe wspomagane ładunkiem dodatnim (positive charge-assisted H-bond, (+)CAHB),
- CL5 – silne wiązanie wodorowe wspomagane rezonansem (resonance - assisted H-bond, RAHB), wcześniej określone przez Jeffrey’a i Saengera [16] jako wiązanie kooperatywne z udziałem elektronów π (π -bond cooperative H-bond),
- CL6 – średniej mocy wiązanie wodorowe wspomagane polaryzacją ładunków (polarization-assisted H-bond, PAHB), wcześniej określone przez Jeffrey’a i Saengera jako wiązanie kooperatywne z udziałem elektronów σ (σ -bond cooperative H-bond).

Moje badania skupione są na poszukiwaniu w kryształach wybranych związków różnych rodzajów wiązań wodorowych w obrębie grup 1.1 i 1.2 z kategorii I i klasy 1.

3. Kooperatywne wiązanie wodorowe

Z powodu takich cech wiązania wodorowego jak polaryzowalność lub przeniesienie ładunku, energia wiązania kooperatywnego jest większa niż suma energii poszczególnych wiązań:

$$E(\text{DH}\cdots\text{A})_n > n E(\text{DH}\cdots\text{A})$$

Koncepcja kooperatywnego układu wiązań wodorowych została wyłoniona na podstawie rozważań teoretycznych dotyczących cząsteczek wody przez H.S. Franka w roku 1958 i Kavanau w 1964 [19, 20] oraz obliczeń *ab initio* (Del Bene, J.A. Pople, 1970 [21] Hankins i Moskowitz, 1970r [22]). „Nietypowe” wiązania wodorowe zostały zauważone przez Jeffreya,

Autoreferat

Gresta i Tagaki'ego w 1977 r. [23]. Pojęcie wiązań kooperatywnych pojawia się w pracy Jeffrey'a i Lewisa, z 1978 pt. „Cooperative aspects of hydrogen bonding in carbohydrates”[24]. Wykonane obliczenia teoretyczne dla cząsteczek metanolu pokazały, że w trimerze zysk energii wynosi 12% na każde wiązanie, co odpowiada skróceniu wiązań $H\cdots A$ o $0.08\text{\AA}$ [25].

Rodzaje kooperatywnych wiązań wodorowych:

a) z udziałem wiązania σ (σ -bond cooperativity) – polaryzacja na wiązaniach σ grup O-H



Wykorzystane zostały tutaj donorowo-akceptorowe zdolności grupy hydroksylowej. Grupy $>\text{NH}$ i NH_2 są rzadkimi akceptorami.

b) z udziałem wiązania π (π -bond cooperativity) - związane wodorowo grupy funkcyjne są powiązane wiązaniami o charakterze π , zachodzi polaryzacja elektronów w multipolowym wiązaniu kowalencyjnym np. $-\text{COOH}$.

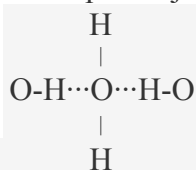
- W białkach usztywnia się wiązanie peptydowe, wzrasta procent wiązania podwójnego (C-N).
- Stabilizacja par Watsona-Cricka w kwasach nukleinowych przez delokalizację elektronów (resonance assisted hydrogen bond, RAHB [26]).

Topologia wiązań kooperatywnych

a) homodromowe – biegnące w jednym kierunku

Łańcuch sekwencyjny np. zbudowany z cząsteczek wody jest energetycznie bardziej korzystny niż układy :

- podwójny donator $\text{O}\cdots\text{H}-\text{O}-\text{H}\cdots\text{O}$
- lub podwójny akceptor



b) antydromowe – biegnące w przeciwnych kierunkach

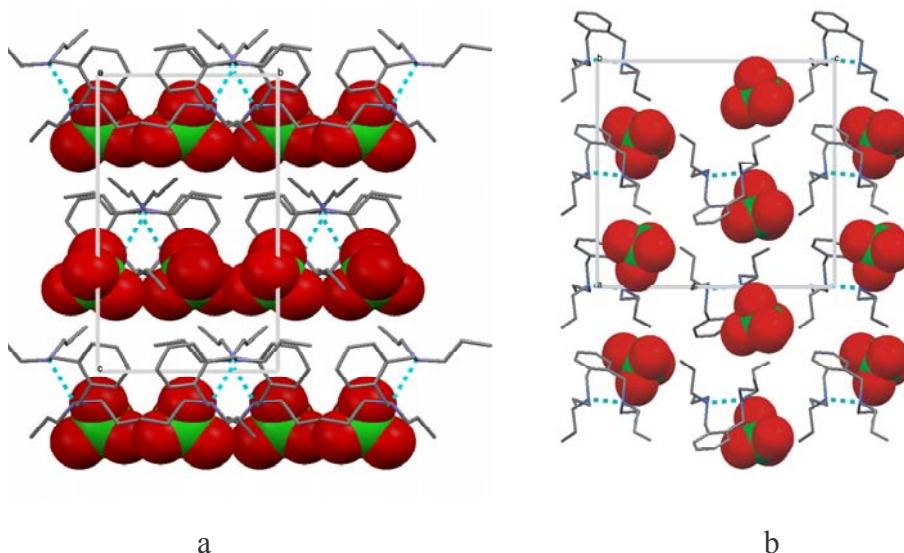
c) heterodromowe – wiązania kooperatywne zorientowane w różnych kierunkach

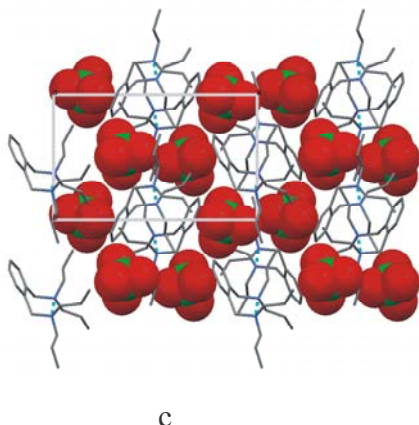
Klasycznym przykładem wiązania homodromowego może być łańcuch związanych wodorowo grup hydroksylowych.

4. Omówienie ważniejszych osiągnięć

Moje badania związane są z funkcjonalnością wiązania wodorowego w kryształach organicznych. W pierwszej kolejności określiłam typ wiązań wodorowych. Zwróciłam szczególną uwagę na rozkład ładunków na atomach donora (D) i akceptora (A). Następnie rozpoznawałam motywy strukturalne w sieci krystalicznej i analizowałam strukturę pod kątem możliwości utworzenia różnych typów wiązań wodorowych, w tym także kooperatywnych wiązań wodorowych. Po uwzględnieniu tych czynników przystąpiłam do oceny roli wiązań wodorowych w stabilizowaniu konformacji i aranżacji cząsteczek i jonów w sieci krystalicznej oraz próbowałam wyjaśnić jaki to ma wpływ na własności fizykochemiczne kryształu.

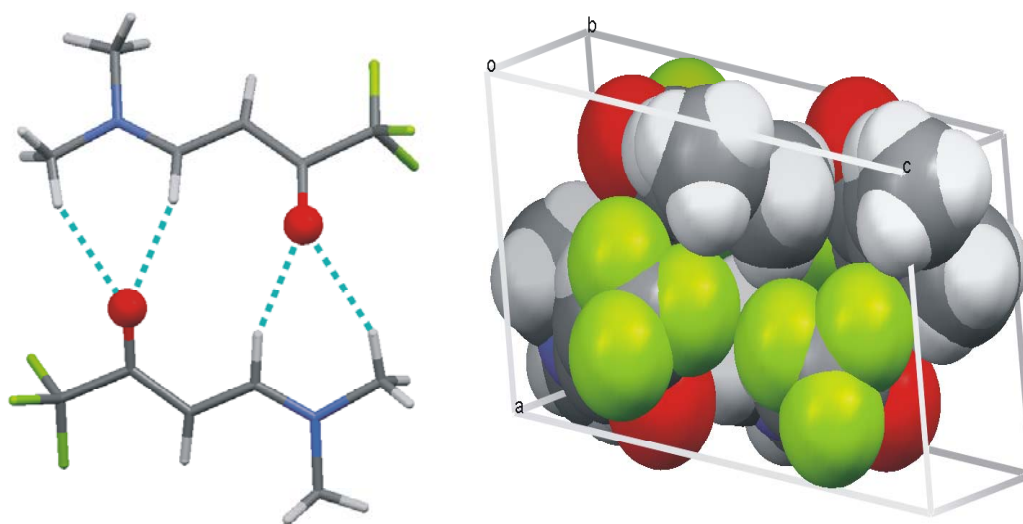
Szczegółowej analizie strukturalnej poddałam wiązania wodorowe typu $N-H\cdots X$, $O-H\cdots X$ oraz słabe oddziaływania $C-H\cdots X$ [**H1-H14**]. Na tej podstawie mogłam stwierdzić, że kluczową rolę w przyjęciu i zachowaniu określonej konformacji badanych cząsteczek, jonów i zwitterjonów odgrywają klasyczne wiązania wodorowe. Np. w przypadku protonowanego 1,2-bis(dipropyloaminometylo)benzenu ($DPAMBH^+$) obecnego w kryształach soli nadchloranowej [**H6**] jest to silne wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe $N^+-H\cdots N$ wspomagane ładunkiem dodatnim (+)CAHB. Uformowany pod względem konformacyjnym kation $DPAMBH^+$, na skutek spięcia dwóch „ramion” cząsteczki za pomocą wiązania wodorowego, wbudowuje się w wolne przestrzenie sieci krystalicznej utworzone przez aniony nadchloranowe (Rys. 1a, b, c).





Rys. 1 a, b, c. Upakowanie kationów DPAMBH⁺ i anionów ClO₄⁻ w komórce elementarnej w rzutach wzdłuż osi **a**, **b** i **c**. Dla przejrzystości atomy wodoru zostały pominięte. Aniony nadchloranowe obwiedzione są promieniami van der Waalsa. Linie przerywane oznaczają wiązanie wodorowe.

W sieciach krystalicznych, w których nie mamy silnych donorów protonu, wzrasta rola nieklasycznych wiązań wodorowych C-H...X z grupy 1.2, czego spektakularnym przykładem jest dimeryzacja enaminoketonów za pomocą wiązań C-H...O, co dokładnie przedstawiłam w publikacji [H4]. Cząsteczki 4-N,N-dimetyloamino-1,1,1-trifluoro-3-buten-2-onu dimeryzują poprzez utworzenie między olefinowymi atomami wodoru a atomami tlenu grup karbonylowych krótkiego wiązania wodorowego C-H...O.

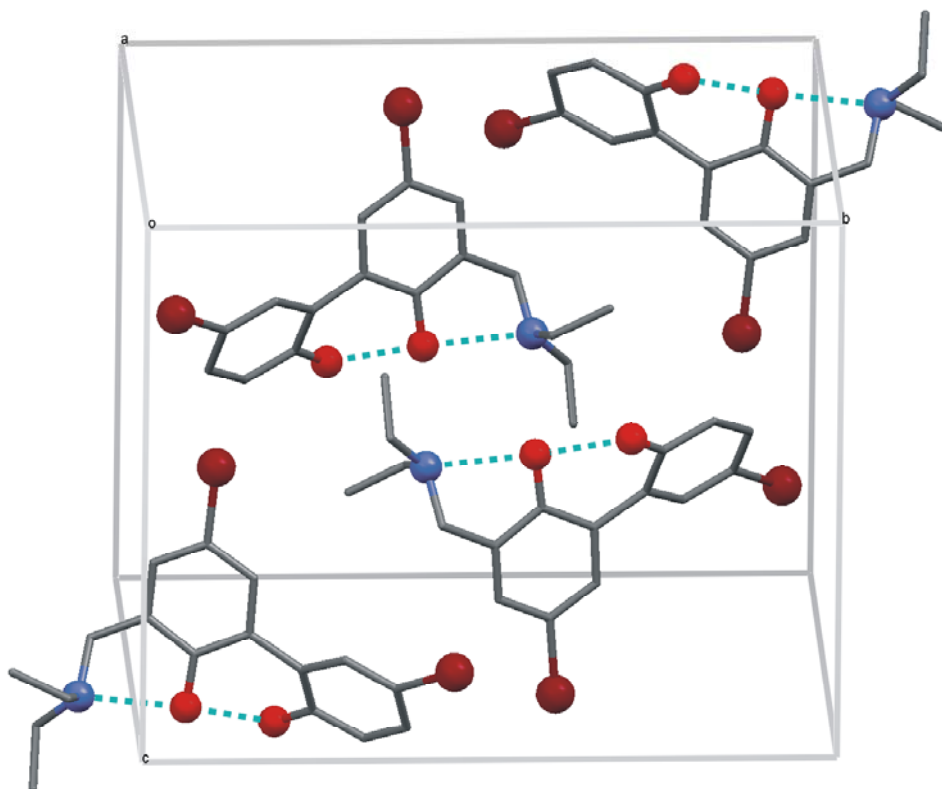


Rys. 2. Dimeryzacja i upakowanie cząsteczek 4-N,N-dimetyloamino-1,1,1-trifluoro-3-buten-2-onu w komórce elementarnej.

Na podstawie rentgenowskiej analizy strukturalnej przeprowadzonej w 110K stwierdziłam, że związek ten krystalizuje w grupie przestrzennej P1̄. Asymetryczna część komórki elementarnej zawiera dwie cząsteczki (**A** i **B**) 4-N,N-dimetyloamino-1,1,1-trifluoro-3-buten-

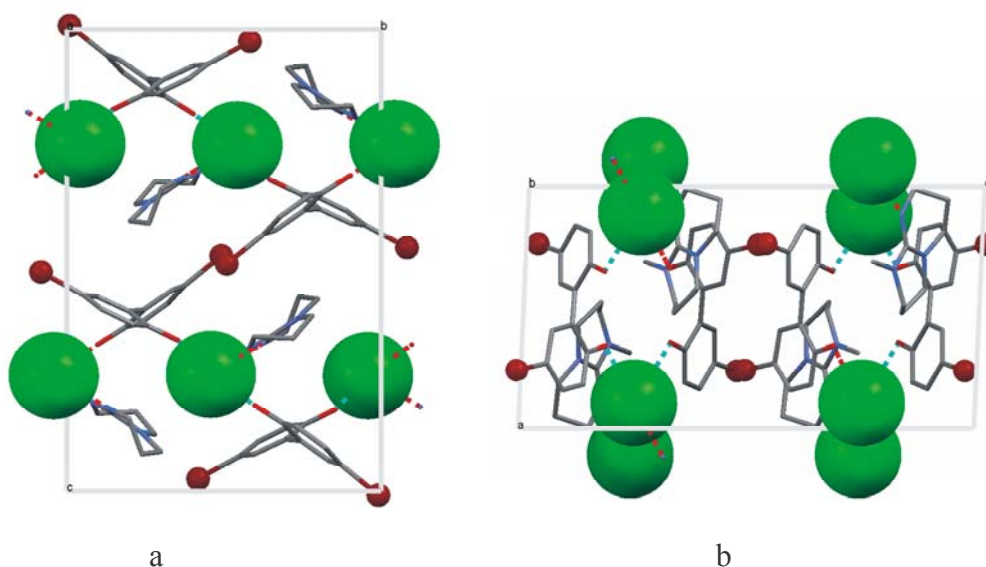
2-onu (Rys. 3). W kryształe każda cząsteczka przyjmuje tę samą konformację *E-s-Z*. Przyjęcie takiej konformacji pozwala na utworzenie związanego wodorowo cyklicznego dimeru. Wbrew naszym wcześniejszym oczekiwaniom, cząsteczki **A** i **B** nie odgrywają identycznej roli w kryształcie a atomy O(1A) i O(1B) oddziałują z różną siłą z grupami C-H. Atom O(1A) jest akceptorem protonu z C(4B)-H(4B) i tworzy wiązanie wodorowe C-H...O, dla którego długość C...O wynosi 3.444(3) Å a kąt C-H...O wynosi 161(2)°. Atom tlenu O(1B) jest podwójnym akceptorem atomów wodoru z cząsteczki **A**: C(5A)-H i C(4A)-H., tworząc znacząco krótsze wiązania wodorowe C-H...O. Odległości donor...akceptor wynoszą 3.259(3) Å oraz 3.161(3) Å i należą do jednych z krótszych wiązań wodorowych C-H...O. Rozpatrywany dimer nie jest centrosymetryczny. Cząsteczki **A** i **B** nie są koplanarne.

Z kolei konformacja cząsteczki 5,5'-dibromo-3-dietyloaminometylo-2,2'-bifenolu (zasady Mannicha) [**H1**] została zdeterminowana przez zahamowanie rotacji wokół wiązania pojedynczego C(1)-C(1') w momencie, kiedy zostały spełnione warunki przestrzenne do utworzenia kooperatywnego antydromowego wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego N⁺-H...O⁻...H-O (Rys. 3).



Rys. 3. Aranżacja cząsteczek 5,5'-dibromo-3-dietyloaminometylo-2,2'-bifenolu w komórce elementarnej. Atomy wodoru zostały pominięte.

W kryształach chlorowodoru 7-metylo-1,5,7-triazabicyclo[4.4.0]-dec-5-enu (MTBD) z 5,5'-dibromo-2,2'-bifenolem (DBBPh) czynnikiem przeszkadzającym w tworzeniu spodziewanego typu $N^+-H\cdots O^-\cdots H-O$ międzycząsteczkowego kooperatywnego wiązania wodorowego okazał się anion chlorkowy [H2]. Nastąpiła rearanżacja wiązań wodorowych: anion chlorkowy jest akceptorem w czterech wiązaniach wodorowych: $N^+(05)-H\cdots Cl^-$, $O(1)-H\cdots Cl^-$, $O(2)-H\cdots Cl^-$ i $C-H\cdots Cl^-$ (Rys. 4a i 4b).



Rys. 4a i 4b. Rola anionów chlorkowych w sieci krystalicznej MTBD·DBBPh·HCl, Atomy bromu zaznaczone są na ciemnoczerwono. Aniony Cl^- (zielone) zostały obwiedzione promieniami van der Waalsa

Ten negatywny wynik stał się niezmiernie cenny w rozważaniach związanych z mechanizmem działania pompy protonowej w bakteriorodopsynie, co było przedmiotem badań w ramach grantu KBN.

Bakteriorodopsyna (BR) jest białkiem błonowym występującym u halobakterii (*Halobacterium halobium*) i określana jest jako pompa protonowa. Posiada zdolność przenoszenia protonów przez błony komórkowe pod wpływem światła [27]. Wytworzona różnica stężeń jonów wodorowych wykorzystywana jest następnie do syntezy ATP. Struktura bakteriorodopsyny została określona przez Hendersona i współpracowników [28] przy użyciu wysokorozdzielczej kriomikroskopii elektronowej. Cząsteczka BR składa się z siedmiu transmembranowych helis α i wiąże jedną cząsteczkę retinalu. Na podstawie badań rentgenograficznych i neutronograficznych Dencher i współpracownicy [29-32] zauważyli zmianę struktury trzecio- i czwartorzędowej BR podczas fotocyklu. Bakteriorodopsyna ma barwę fioletową a maksimum absorpcji przypada dla długości fal odpowiadające barwie zielonej (pasmo 500-650 nm, z maksimum absorpcji przy 568 nm). Pochłonięcie fotonu przez

Autoreferat

cząsteczkę retinalu prowadzi do zmian konformacyjnych (*cis-trans*) części białkowej, których efektem jest przeniesienie protonu przez błonę komórkową. Grupa chromoforowa jest przyłączona kowalencyjnie do Lys216 i tworzy zasadę Schiffa. Po fotoizomeryzacji cząsteczki retinalu, proton przenoszony jest na Asp85. Miejsce przyłączenia protonu znajduje się po stronie zewnątrzkomórkowej. Retinal powraca do pierwotnej postaci w wyniku pobrania protonu z Asp96 znajdującej się po stronie wewnątrzkomórkowej. Proton z Asp85 uwalniany jest po stronie zewnątrzkomórkowej, a Asp96 pobiera proton z wnętrza komórki. W efekcie tych przemian stężenie protonów wzrasta w przestrzeni zewnątrzkomórkowej i maleje wewnątrz komórki [33].

W pracach [H1] i [H2] badałam modelowe układy fragmentów łańcuchów związanych wodorowo. Pierwszy model zawierał N-zasadę i dwie grupy fenolowe. Utworzyło się kooperatywne antydromowe wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe $N^+ \cdots H \cdots O^- \cdots H-O$, którego geometrię przedstawiłam w pracy [H1]. Drugi układ modelowy początkowo wybrany do badań składał się z MTBD o zasadowości porównywalnej z zasadowością reszty guanidynowej argininy i dibromowej pochodnej 1,1'-bifenolu. Cząsteczka MTBD nie ma grupy NH, ale atom azotu N(05) łatwo ulega protonowaniu, deprotonując przy tym fenol. Po wykonaniu rentgenowskiej analizy strukturalnej okazało się, że w strukturze znalazł się anion chlorkowy, którego pochodzenie trudno było wytłumaczyć analizując przebieg syntezy. Ze względu na ważną rolę anionów chlorkowych w systemach biologicznych została przeprowadzona synteza MTBD·DBBPh·HCl, którego struktura została raz jeszcze potwierdzona rentgenograficznie.

Niespodziewanie badania krystalograficzne, które prowadziłam dla modelowych związków pokazały jak duże znaczenie może mieć obecność jonów chlorkowych w zakłóceniu transportu protonów przez membrany.

Transport anionów Cl^- przez membrany pod wpływem światła odbywa w białku, które ma podobne właściwości co bakteriorodopsyna, a mianowicie w przenoszącej jony chlorkowe halorodopsynie [34].

L-selenometionina (L-SeMet) jest szeroko wykorzystywana w krystalografii białek jako nośnik atomu selenu. Aminokwas ten może być łatwo wprowadzony do białek podczas ich produkcji metodą nadekspresji w systemach bakteryjnych. Zdolność selenu do anomalnego rozpraszania promieni rentgenowskich w pobliżu progu absorpcji jest przydatna do rozwiązywania struktur makrocząsteczek metodą dostrojonej dyfrakcji anomalnej (MAD) [35]. Z tego względu zaskakującym wydawał się fakt, że struktura krystaliczna L-SeMet nie została wcześniej określona. W krystalograficznej bazie danych CSD zdeponowana była jedynie struktura racemicznej formy selenometioniny.

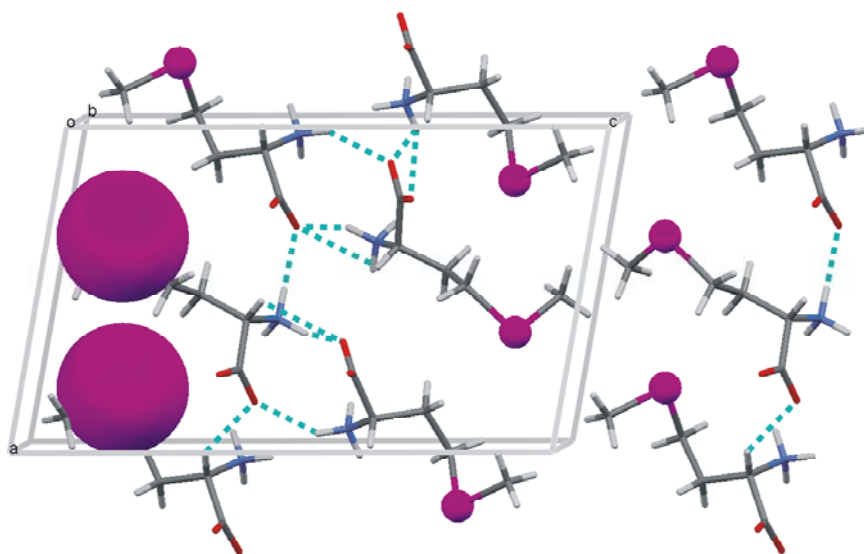
Selen jest bardzo ważnym mikroelementem w diecie człowieka i zwierząt. Działa synergicznie z witaminą E, zapobiegając starzeniu się komórek pod wpływem utleniania oraz decyduje o naszej vitalności. Selen jest niezbędny w syntezie glutationu, który wytwarzany jest w zdrowej wątrobie. Zaobserwowano, że liczba zgonów spowodowanych chorobą nowotworową ma związek ze spożyciem selenu. W Japonii, gdzie średnie spożycie selenu jest dwukrotnie większe niż w wielu krajach, zachorowalność na raka jest pięciokrotnie mniejsza. Niedobór selenu przyczynia się do wystąpienia zaburzeń skurczu mięśnia sercowego, miopatii, choroby Keshana, impotencji i do spadku vitalności. Zawartość selenu w glebie na terenie Polski i wielu rejonach Europy jest stosunkowo niska. Dodatkowo zmniejszona jest przyswajalność tego biopierwiastka przez rośliny z powodu zakwaszenia gleby. Badania przeprowadzone w celu określenia zawartości selenu w glebie i w wybranych narządach saren (*Capreolus capreolus*) z rejonu Wielkopolski pokazały, że obszar ten jest niedoborowy w selen [36].

Niedobór selenu w organizmie może być uzupełniany dobrze wchłanialną naturalną L-selenometioniną.

Znaczenie biologiczne było inspiracją do szerszych badań strukturalnych i fizykochemicznych tego aminokwasu. Historia thalidomidu pokazała, jak niebezpieczny może być brak wiedzy na temat struktury trójwymiarowej cząsteczki leku.

Metodą dyfrakcji promieni rentgenowskich określiłam niskotemperaturową strukturę krystaliczną L-selenometioniny [H7]. Związek ten krystalizuje w chiralnej grupie przestrzennej $P2_1$. W niezależnej części komórki elementarnej znajdują się dwie cząsteczki selenometioniny w formie jonu obojnaczego. W sieci krystalicznej występują warstwy cząsteczek leżące w płaszczyźnie *ab*, charakteryzujące się naprzemianległym ułożeniem

warstw hydrofobowych i hydrofilowych (Rys. 5). W hydrofilowych oddziaływaniach atomów łańcucha głównego istnieje ciekawa sieć wiązań wodorowych.



Rys. 5. Rozmieszczenie cząsteczek L-selenometioniny w komórce elementarnej. W dwóch przypadkach atomy selenu zostały obwiedzione promieniami van der Waalsa. Liniami przerywanymi zaznaczone są wiązania wodorowe.

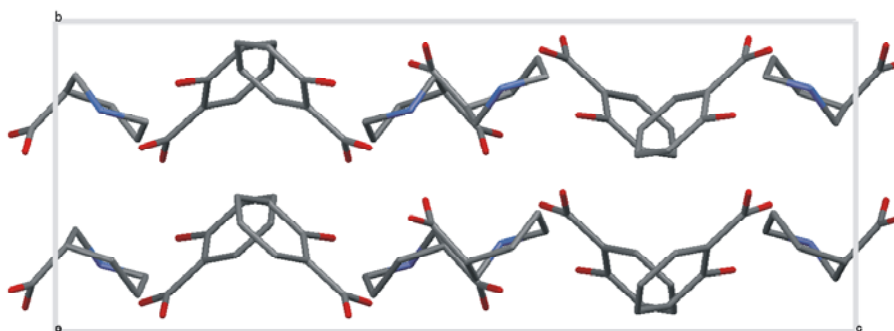
Oddziaływania hydrofobowe występują pomiędzy łańcuchami bocznymi aminokwasów. Badania z wykorzystaniem różnicowej kalorymetrii skaningowej (DSC) krystalicznej L-selenometioniny wykazały wielostopniowy mechanizm przemian fazowych, z wyraźnie zaznaczonymi przejściami w temperaturach 280,5 K i 312,0 K. Procesy te związane są ze zmianą symetrii w obrębie komórki elementarnej.

Kwas nipekotynowy (P3C, kwas piperydino-3-karboksylowy) jest β -aminokwasem i w kryształach występuje w formie zwitterjonowej z grupą karboksylanową w pozycji ekwatorialnej [37]. Natomiast w kompleksie P3C z kwasem p-hydroksybenzoesowym (HBA) podstawnik karboksylanowy zajmuje w pierścieniu piperydyniowym pozycję aksjalną, która jest stabilizowana przez wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe typu N-H $\cdots$ OOC [38].

Kwas nipekotynowy tworzy z kwasem **salicylowym** (SAL) kompleks molekularny [H11] o stechiometrii 1:1, który krystalizuje, podobnie jak P3C·HBA [32], w grupie przestrzennej *Pbca*. Pierścień piperydyniowy ma konformację krzesłową z grupą karboksylanową w pozycji aksjalnej. Cząsteczki SAL i P3C łączą się z sobą poprzez wiązanie wodorowe typu COOH $\cdots$ OOC o długości 2.537(1) Å. Dwa wewnątrzcząsteczkowe wiązania

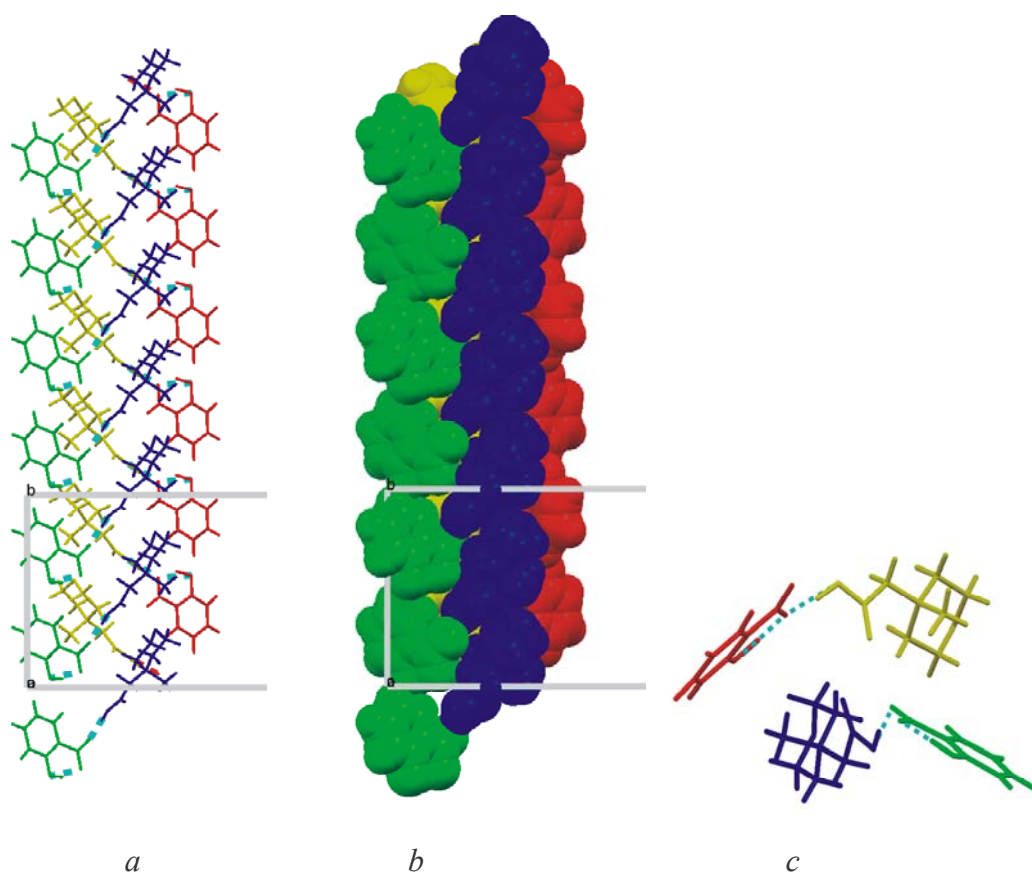
wodorowe $N^+-H\cdots OOC$ (2.845(1) Å) i $O-H\cdots O=C$ (2.573(1) Å) stabilizują strukturę obu komponentów kompleksu w kryształach [H11].

Cząsteczki kwasu nipekotynowego, dzięki zaangażowaniu aksjального atomu wodoru w wiązanie $N^+-H\cdots OOC$ (2.801(1) Å), tworzą centrosymeryczny dimer, który z kolei wykorzystując ekwatorialny atom wodoru łączy się z sąsiednimi dimerami poprzez mostek wodorowy $N^+-H\cdots O$ (2.799(1) Å). Te wiązania wodorowe w sieci krystalicznej prowadzą do utworzenia warstw jonów obojnaczych.



Rys. 6. Ułożenie cząsteczek w kryształach kompleksu molekularnego P3C·SAL. Rzut wzdłuż osi *a*.

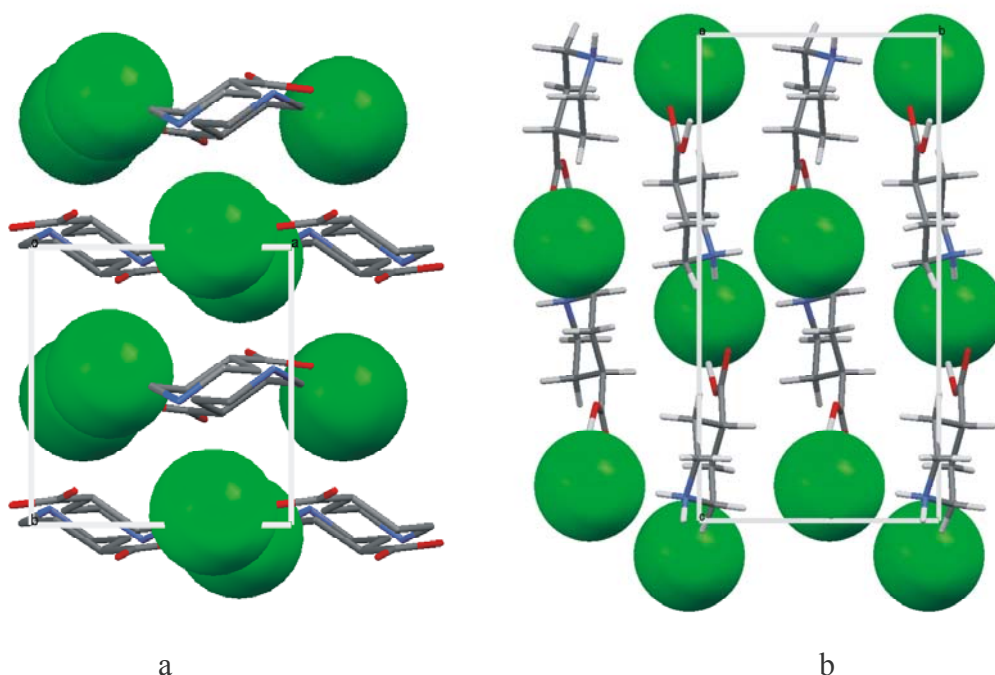
Kryształy kompleksu *N*-metylomorfolinobetainy (MMB) z kwasem salicylowym (SAL) w stosunku 1:1 należą do układu rombowego (grupa przestrzenna *Pbca*) [H3] z następującymi parametrami komórki elementarnej: $a=9.4702(6)$, $b=13.0559(7)$ i $c=45.226(2)$ Å (w 140 K). Asymetryczna część komórki elementarnej składa się z dwu jednostek strukturalnych $MMB^+ \cdot SAL^-$ (oznaczonych literami **A** i **B**). Każda z tych jednostek utworzona została dzięki krótkiemu wiązaniu wodorowemu $O-H\cdots O$ (2.542(2) i 2.474(2) Å) pomiędzy grupą karboksylową kationu betainowego a grupą karboksylanową anionu. Aniony salicylanowe tworzą krótkie wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe $O-H\cdots O$ o długości 2.472(2) dla anionu **A** i 2.525(2) Å dla anionu **B**, pomiędzy grupą hydroksylową w pozycji orto i grupą COO^- , ale akceptor będący atomem tlenu z grupy karboksylanowej w obu przypadkach jest inny.



Rys. 7. Helikalna aranżacja cząsteczek w kryształ kompleksu *N*-metylomorfolinobetainy z kwasem salicylowym.

W obu przypadkach (**A** i **B**), pierścień morfolinowy przyjmuje konformację krzesłową z grupą CH_2COOH w pozycji ekwatorialnej a metylową w aksjalnej. Atomy wodoru grup COOH w obu kationach MMB^+ są usytuowane na tym atomie tlenu, który jest w pozycji *anti* do atomu azotu betainy. Kąt torsyjny $\text{N}(1)\text{-C}(8)\text{-C}(9)\text{-O}(2)$ wynosi $177.2(1)$ dla **A** i $178.8(2)^\circ$ dla **B**.

Chlorowodorek kwasu izonipekotynowego (4-piperydynokarboksylowego, $P4CH^+ \cdot Cl^-$), [H8]. Kwasy karboksylowe bardzo często tworzą centrosymetryczne dimery lub dimery związane symetrią osi dwukrotnej wykorzystując protonodonorowe właściwości grupy karboksylowej. W tej strukturze taka aranżacja cząsteczek nie ma miejsca ze względu na obecność anionu chlorkowego, który jest akceptorem w czterech wiązaniach wodorowych: $O=C-O-H \cdots Cl^-$, $N(1)^+-H \cdots Cl^-$ z udziałem aksjalnych i ekwatorialnych atomów wodoru oraz $C-H \cdots Cl^-$.

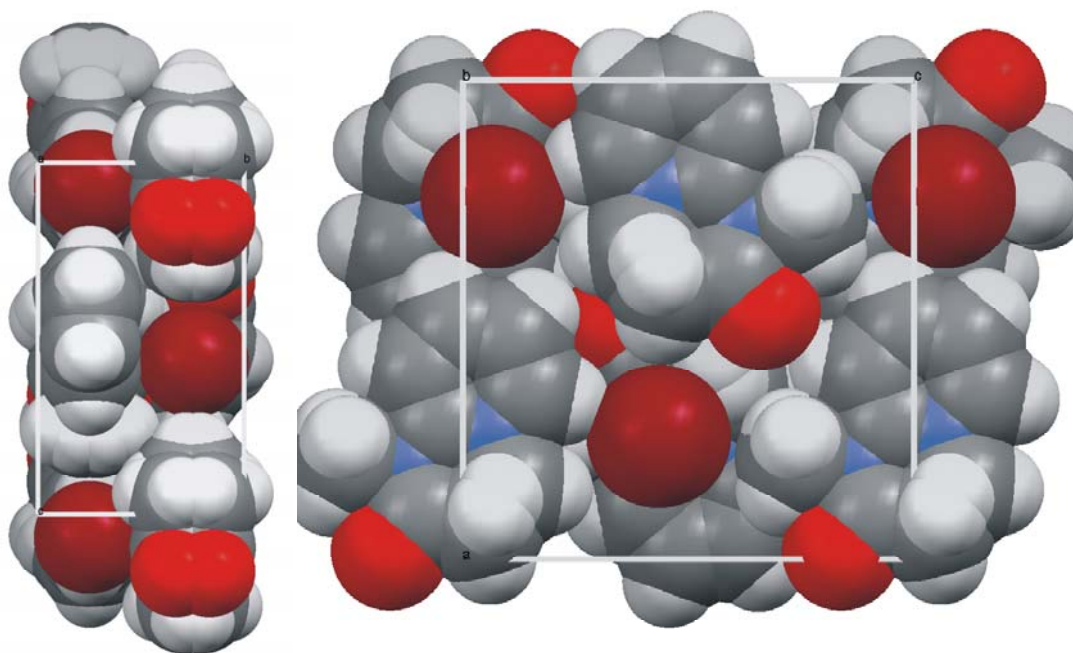


Rys. 8. Kationy $P4CH^+$ i aniony chlorkowe obwiedzione promieniami van der Waalsa w strukturze chlorowodoru kwasu izonipekotynowego (a) w rzucie wzdłuż osi c (b) wzdłuż osi a .

W pracy [H8] są podane czynniki mające wpływ na stabilność pięciu konformerów. Są to: (i) typ wiązania wodorowego, (ii) odległość między dodatnio naładowanym atomem azotu $N^+(1)$ a atomami tlenu $O(1)$ i $O(2)$, (iii) konformacja grup karbonylowych oraz (iv) moment dipolowy. Spełniona jest ogólna zasada, iż ekwatorialne konformery alkilocykloheksanów i sześcioczłonowe cykloaminy są bardziej stabilne niż konformery aksjalne.

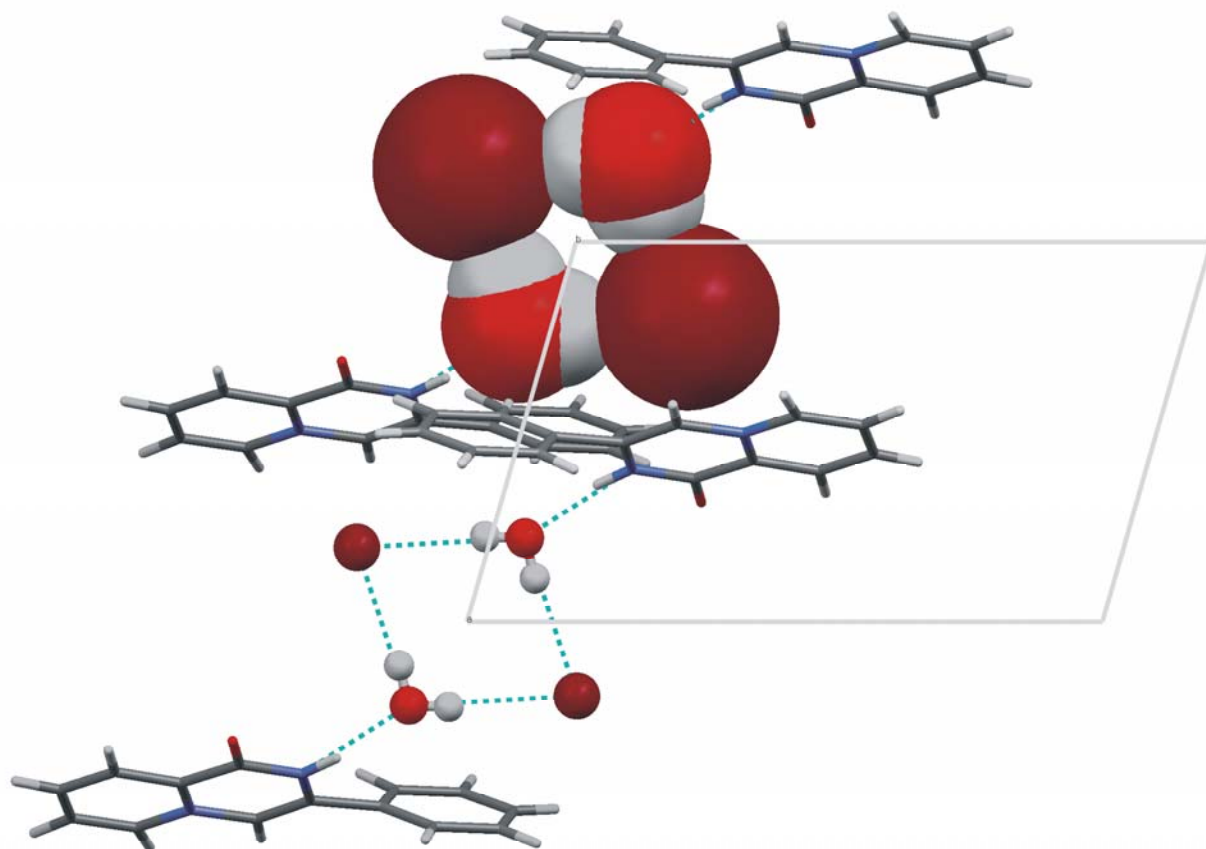
Jak będą oddziaływać jony dwubiegunowe **1-metyloizonikotynianu** w kryształach monowodzianu [H10]? Grupa N^+-CH_3 , która posiada dodatni ładunek zlokalizowany na atomie azotu, nie uczestniczy w wiązaniu wodorowym. Jednak w stabilizacji struktury krystalicznej pomagają tutaj cząsteczki wody, służąc jako podwójne donory w wiązaniach wodorowych $O-H \cdots O^-$.

Bromek 1-metylo-2-okso-pirydo[2,1b][3,4]diwodoropirymidyniowy [**H9**] występuje w formie tautomerycznej keto. Struktura tego kryształu jest doskonałym przykładem ilustrującym słaby udział wiązań wodorowych w stabilizowaniu konformacji badanej cząsteczki ze względu na nieuporządkowanie kationu (Rys. 9).



Rys. 9. Upakowanie jonów w kryształ bromku 1-metylo-2-okso-pirydo[2,1b][3,4]diwodoropirymidyniowego. Rzut wzdłuż osi **a** i **b**.

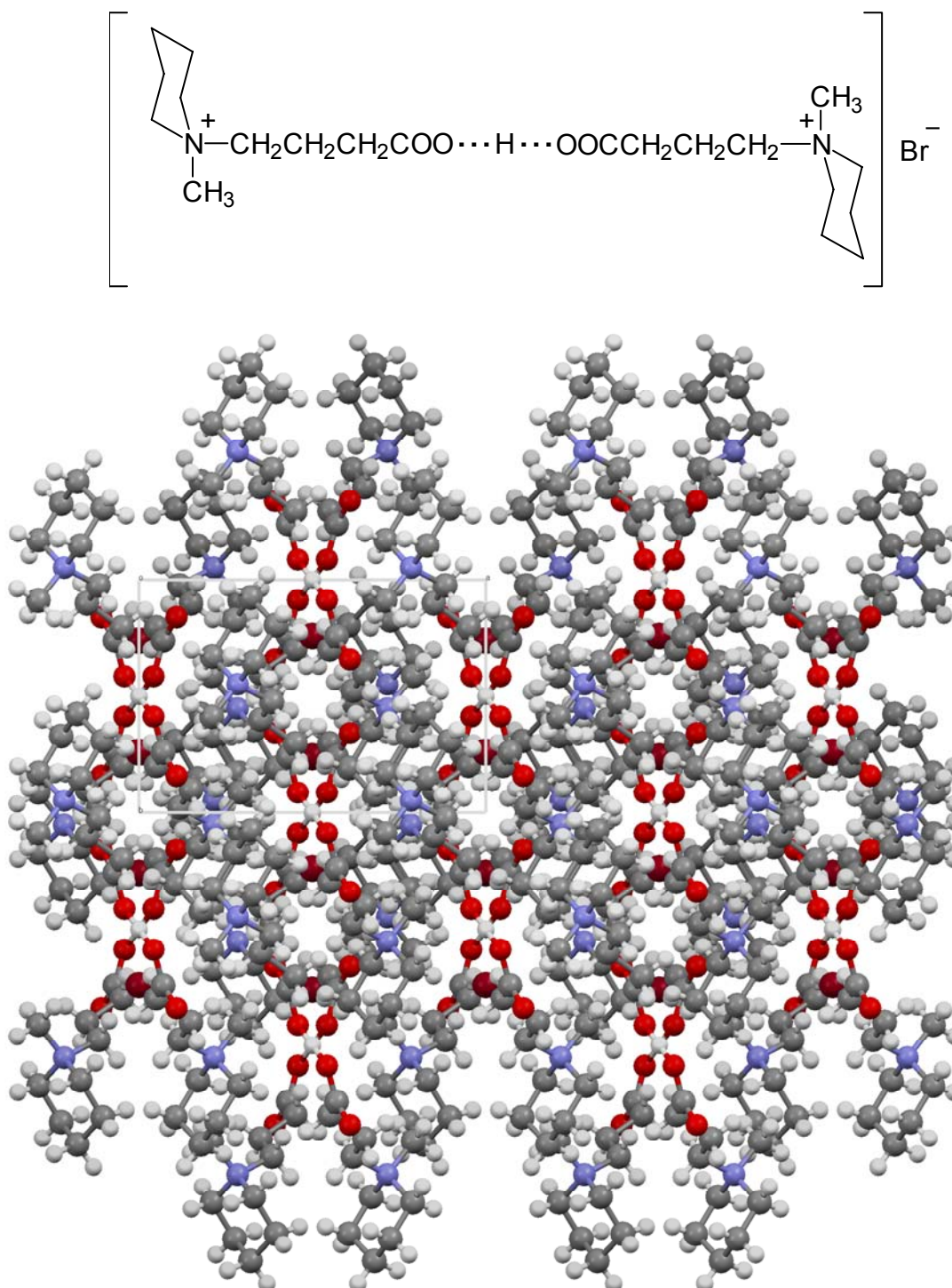
Struktura jednowodnego bromowodoru 1-okso-3-fenyl-pirydo[1,2a]pirazyny [**H5**] jest przykładem, w którym swobodna rotacja wokół wiązania $C_{\text{aryl}} - C_{\text{aryl}}$ nie została zahamowana na skutek wewnątrzcząsteczkowego wiązania wodorowego, ponieważ nie ma ku temu odpowiednich warunków geometrycznych. Cząsteczka występuje w formie tautomerycznej keto. Tautomeria jest zależna od podstawnika. Dla porównania, cząsteczka 2-bromo-2-hydroksypirydyny w kryształach występuje w formie enolowej [39] i tworzy cykliczny dimer dzięki wiązaniom $O-H \cdots N$ (2.757(4) Å). Konformacja prezentowanej struktury stabilizowana jest dzięki elektrostatycznym oddziaływaniom pomiędzy anionem Br^- a atomem N^{+5} kationu organicznego oraz dzięki wiązaniom wodorowym $O-H \cdots Br^-$. Oczywiście oddziaływania elektrostatyczne mają większe znaczenie. Wiązanie wodorowe w strukturze jest dłuższe o 0,02 Å niż w pirydynie [34], co powoduje skrócenie wiązania $C=O$.



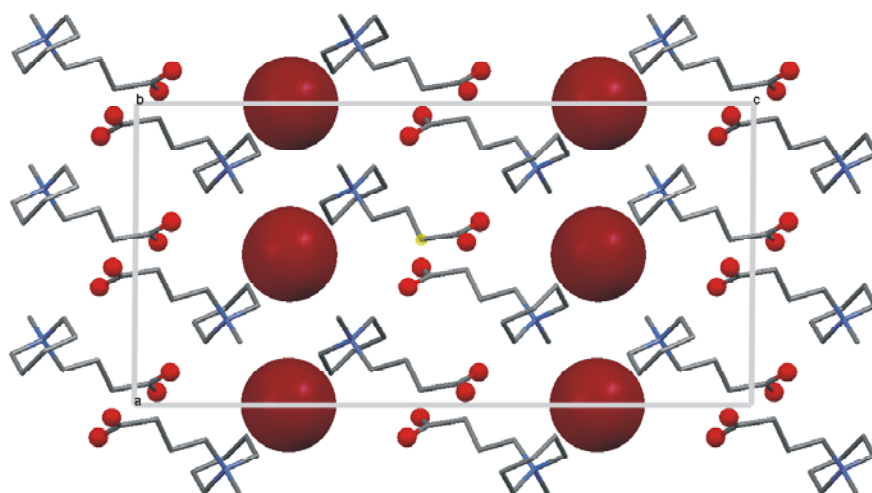
Rys. 10. Oddziaływania jonów bromkowych z cząsteczkami wody poprzez wiązanie wodorowe w kryształach jednowodnego bromowodoru 1-okso-3-fenyl-pirydo[1,2a] pirazyny. Rzut wzdłuż osi **a**.

Rysunek 10 ilustruje jak dużą rolę odgrywają wiązania wodorowe między cząsteczkami wody a anionem bromkowym, które odpowiedzialne są za utworzenie szerokiej warstwy w tej strukturze „kanapkowej”. Natomiast wiązania N-H...O są klejem wiążącym warstwy kationowe z anionowymi.

W kryształe bromowodorku bis(maślanu-4-N-metylopiperydyniowego), (MPBu)₂HBr [H12] kationy związane są ze sobą krótkim symetrycznym wiązaniem wodorowym O···H···O, tworząc tzw. kationy skoniugowane. Poniższy rysunek 10 przedstawia bardzo ciekawą aranżację, również pod względem artystycznym.



Rys. 11. Aranżacja kationów i anionów w strukturze (MPBu)₂HBr. Rzut wzdłuż osi c.

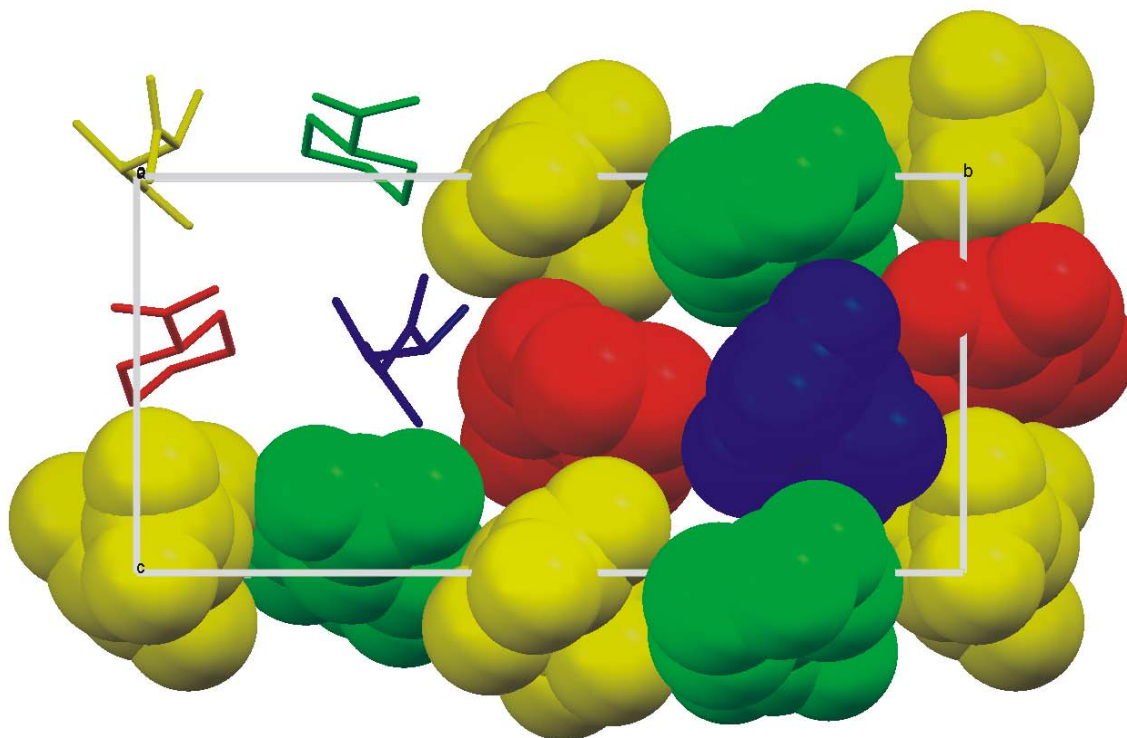


Rys. 12. Upakowanie kationów $(\text{MPBu})_2\text{H}^+$ i anionów bromkowych (obwiedzionych promieniami van der Waalsa) w rzucie wzdłuż osi krystalograficznej **b**. Atomy wodoru zostały pominięte.

W strukturze $(\text{MPBu})_2\text{HBr}$ pierścień piperydyny przyjmuje konformację krzesłową. Większy podstawnik $-(\text{CH}_2)_3\text{COO}$ znajduje się w pozycji aksjalnej, a grupa metylowa w pozycji ekwatorialnej. Dwie jednostki strukturalne MPBu są połączone wiązaniem wodorowym, w którym proton obsadza centrum symetrii, tworząc kation $(\text{MPBu})_2\text{H}^+$ z krótkim symetrycznym wiązaniem wodorowym $\text{O}\cdots\text{H}\cdots\text{O}$ ($\text{O}\cdots\text{O}$ 2.436(2)Å). Anion bromkowy znajduje się na osi dwukrotnej.

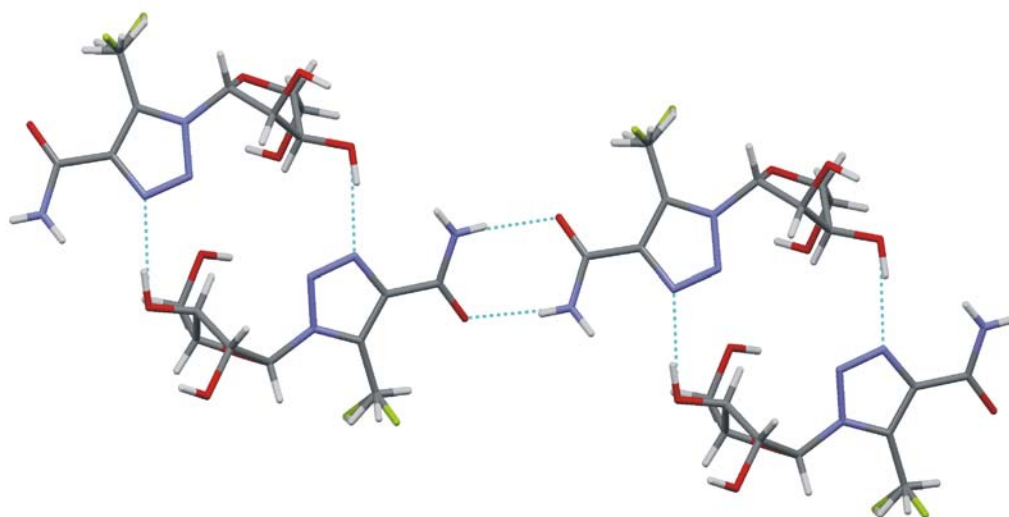
Wyjątkowe właściwości kwasu *R,R*-winowego obserwujemy w kompleksie z kwasem nipekotynowym [**H13**]. Kwas nipekotynowy jest komercyjnie dostępnym związkiem, który stanowi mieszaninę stereoizomerów *R* i *S* z centrum chiralności na węglu C-3. Jako zwitterjon posiada protono-donorową grupę N^+H_2 i grupę karboksylanową COO^- będącą dobrym akceptorem protonów. Kwas *2R,3R*-winowy posiada dwa różne typy centrów protono-donorowych: dwie grupy karboksylowe i dwie hydroksylowe. W chemii organicznej kwas *2R,3R*-winowy używany jest w syntezie stereoselektywnej z zablokowaną grupą karboksylową lub hydroksylową bądź też w postaci kwasowej. Z aminami czy zwitterjonami kwas *2R,3R*-winowy tworzy sole o stechiometrii 1:1 lub 1:2, które bardzo często różnią się rozpuszczalnością, dzięki czemu kwas winowy znalazł zastosowanie przy rozdziale stereizomerów [40]. Badana przeze mnie struktura jest jednak ciekawym wyjątkiem, pokazującym, że do takiego rozdziału nie doszło.

Kwas *2R,3R*-winowy tworzy dwa niezależne kompleksy z izomerami *R* and *S* kwasu nipekotynowego. Cząsteczki są połączone przez następujące wiązania wodorowe: $\text{N}^+\text{H}\cdots\text{O}-\text{H}$, $\text{COOH}\cdots\text{OOC}$, $\text{N}^+\text{H}\cdots\text{OOC}$, $\text{O}-\text{H}\cdots\text{O}-\text{C}$ oraz $\text{O}-\text{H}\cdots\text{O}=\text{C}$.



Rys. 13. Wypełnienie przestrzeni w komórce elementarnej przez kationy $(S)\text{-P3CH}^+$ (kation **A** na zielono) i $(R)\text{-P3CH}^+$ (kation **B** na czerwono) oraz aniony $(2R,3R)\text{-TA}^-$ (anion **A** na niebiesko, anion **B** na żółto). Atomy wodoru zostały pominięte. Rzut wzdłuż osi **a**.

W pracy [H14] porównałam strukturę badanego związku, amidu kwasu 5-fluorometylo-1- β -D-rybofuranosylo-1*H*-[1,2,3]triazolo-4-karboksylowego, z cząsteczkami rybawiryny V1 i V2 badanymi przez Prusinera [42] pod kątem wiązań wodorowych, gęstości kryształu i temperatury topnienia. Parowanie fragmentów zasad, które ma miejsce w badanej przeze mnie strukturze, nie występuje w obu formach rybawiryny. Jedyne podobieństwo polega na tym, że wiązanie O3'-H...N3 ma swój odpowiednik w strukturze V1. Pozostałe wiązania wodorowe mają zupełnie inny schemat oddziaływań. Wspólny jest też brak zaangażowania w wiązanie wodorowe drugiego atomu wodoru z grupy amidowej. Gęstość badanego przeze mnie kryształu jest bliższa gęstości V2, natomiast temperatura topnienia jest nawet wyższa od temperatury topnienia kryształu V1.



Rys. 14. Tworzenie pary zasad azotowych w kryształcie amidu kwasu 5-fluorometylo-1- β -D-rybofuranosylo-1*H*-[1,2,3]triazolo-4-karboksylowego.

Parowanie fragmentów zasad w kryształcie badanego związku to podstawowa różnica w porównaniu z kryształami rybawiryny, które tej cechy nie mają, a mimo to parowanie rybawiryny z zasadami w kwasach nukleinowych jest jednym z głównych mechanizmów aktywności przeciwwirusowej tego związku [43]. W roztworze występują oba rotamery grupy amidowej rybawiryny, dzięki temu mogą być rozpoznawane przez wirusową polimerazę RNA na zasadzie komplementarności z resztami uracylu i cytozyny znajdującymi się w matrycowym RNA [44]. Na podstawie badań krystalograficznych mogę sądzić, że badany związek może tworzyć wiązanie wodorowe z uracylem.

5. Cytowana literatura

- [1] A. I. Kitajgorodski (1976) *Kryształy molekularne*. PWN, Warszawa
- [2] C. Giacovazzo, H. L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti (2000) *Fundamentals of Crystallography*, edited by Giacovazzo, IUCr, Oxford University Press.
- [3] A. Werner (1902) Über Haupt- und Nebenvalenzen und die Constitutionen der Ammoniumverbindungen. *Liebigs Ann.* **322**, 261- 97.
- [4] A. Hantzsch (1910) Über die Isomeriegleichgewichte des Acetessigesters und die sogenannte Isorrhopsis seiner Salze. *Chemische Berichte* **43**, 3049- 71.
- [5] Lewis (1923). *Valence and the structure of atoms and molecules*
- [6] L. Pauling (1931) The nature of the chemical bond. Application of results obtained from the quantum mechanics and from a theory of paramagnetic susceptibility to the structure of molecules. *J. Am. Chem. Soc.* **53**, 1367-1400.
- [7] L. Pauling (1939, 1940, 1960) *The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals: An introduction to modern structural chemistry*. Cornell University Press: Itaka, NY
- [8] D. Hadži and H.W. Thompson (Eds.) (1959) *Hydrogen bonding*. Papers presented at the Symposium on Hydrogen Bonding held at Ljubljana, Slovenia, 1957. Pergamon Press: London, UK.
- [9] G.C. Pimentel and A.L. McClellan (1960) *The hydrogen bond*. Freeman: San Francisco, CA
- [10] W.C. Hamilton and J.A. Ibers (1968) *Hydrogen bonding in solids: Methods of molecular structure determination*. Benjamin: New York.
- [11] S. N. Vinogradov and R.H. Linnell (1971) *Hydrogen bonding*. Van Nostrand-Reinhold: New York.
- [12] F. Franks (Ed.) (1972-82) *Water: A comprehensive treatise*. Vols. 1-7. Plenum Press: New York, London.
- [13] M. D. Joesten and L.J. Schadt (1974) *Hydrogen bonding*. Marcel Dekker: New York.
- [14] P. Schuster, G. Zundel and C. Sandorfy (Eds.) (1976). *The hydrogen bond: Recent developments in theory and experiments*. Vols. I-III. North-Holland: Amsterdam, NL.
- [15] I. Olovsson and P.-G. Jönsson (1976) X-ray and neutron diffraction studies of hydrogen bonded systems. In: *The hydrogen bond: Recent developments in theory and experiments*, Vol. II. Edited by P. Schuster, G. Zundel and C. Sandorfy. North-Holland: Amsterdam, NL; Chapter 8, pp. 393-456.
- [16] G.A. Jeffrey, W. Saenger (1991) *Hydrogen bonding in biological structures*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, Germany
- [17] G.M. Desiraju, T. Steiner (1999) *The Weak Hydrogen Bond in Structural Chemistry and Biology*. Oxford University Press Inc., New York.
- [18] G. Gilli, P. Gilli (2009) *The Nature of the Hydrogen Bond. Outline of a Comprehensive Hydrogen Bond Theory*, IUCr, Oxford University Press, Oxford, UK
- [19] H.S. Frank (1958) Covalency in the hydrogen bond and the properties of water and ice. *Proc. R. Soc A* **247**, 481- 492.
- [20] J.L. Kavanau (1964) *Water and solute-water interactions*. Holden-Day: San Francisco, CA.
- [21] J. Del Bene, J.A. Pople (1970) Theory of molecular interactions. I. Molecular orbital studies of water polymers using a minimal Slater type basis. *J. Chem. Phys.* **52**, 4858-4866.

- [22] D. Hankins, J.W. Moskowitz, F.H. Stillinger (1970). Water molecule interactions. *J. Chem. Phys.* **53**, 4544-4554.
- [23] G.A. Jeffrey, M.E. Gress, S. Tagaki (1977) Some experimental observations on H $\cdots$ O hydrogen bond lengths in carbohydrate crystal structures. *J. Am. Chem. Soc.* **99**, 609-611.
- [24] G.A. Jeffrey, L. Lewis (1978) Cooperative aspects of hydrogen bonding in carbohydrates. *Carbohydr. Res.* **60**, 179-182.
- [25] Y.C. Tse, M.D. Newton (1977) Theoretical observations on the structural consequences of cooperativity in H $\cdots$ O hydrogen bonding. *J. Am. Chem. Soc.* **99**, 611-613
- [26] G. Gilli, F. Bellucci, V. Ferretti, V. Bertolasi (1989) Evidence for resonance-assisted hydrogen bonding from crystal-structure correlations on the enol form of the β -diketone fragment. *J. Am. Chem. Soc.* **111**, 1023-1028.
- [27] K.J. Rothschild, *Photochem. Photobiol.* **47** (1988) 883.
- [28] R. Henderson, J.M. Baldwin., T.A. Ceska, F. Zemlin, E. Beckmann, K.H. Downing *Model for the structure of bacteriorhodopsin based on high-resolution electron cryo-microscopy.* *J. Mol. Biol.* **4** (1990) 899–929.
- [29] A.N. Dencher, G. Papadopoulos, D. Dresselhaus, G. Büldt, *Biochim. Biophys. Acta*, **1026** (1990) 51.
- [30] G. Papadopoulos, N.A. Dencher, G. Zaccai, G. Büldt, *J. Mol. Biol.* **214** (1990) 15.
- [31] N.A. Dencher, D. Dresselhaus, G. Zaccai, G. Büldt, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **86** (1989) 7876.
- [32] M.H. Koch, N.A. Dencher, D. Oesterhelt, H.J Plöhn, G. Rapp, G. Büldt, *EMBO J.*, **10** (1991) 521.
- [33] D. Voet, J.G. Voet (2004) *Biochemistry*, Willey International Edition, USA 3rd edition, p. 825-826.
- [34] G. Nagel, T. Szellas, S. Kateriya, N. Adeishvili, P. Hegemann, E. Bamberg, Channelrhodopsins: directly light-gated cation channels. *Biochem. Soc. Trans.* **33** (2005) 863-866.
- [35] W.A. Hendrickson, J.R. Horton and D.M. LeMaster (1990). Selenomethionyl proteins produced for analysis by multiwavelength anomalous diffraction (MAD): a vehicle for direct determination of three-dimensional structure. *EMBO J.* **9**, 1665-1672.
- [36] A. Tomza-Marciniak, M. Bąkowska, B. Pilarczyk, M. Semeniuk, D. Hendzel, J. Udała, A. Balicka-Ramisz, A. Tylkowska. Stężenie selenu w glebie i wybranych narządach saren (*Capreolus capreolus*) z terenu województwa wielkopolskiego. *Acta Sci. Pol., Zootechnika* **9** (2010) 251-260.
- [37] L. Brehm, P. Krogsgaard, G.A.R. Johnston, K. Schaumburg, *Acta Chem. Scand.* **B30** (1976) 542.
- [38] Z. Dega-Szafran, M. Jaskólski, M. Szafran, *Pol. J. Chem.* **81** (2007) 931.
- [39] Å. Kvik , *Acta Crystallogr. B* **32** (1976) 220.
- [40] U. Ohms, H. Guth, E. Hellner, H. Dannöhl, A. Schweig, *Z. Kristallogr.* **169** (1984) 185.
- [41] J. Gawroński, K. Gawrońska, *Tartaric and Malic Acids in Synthesis*, Wiley, New York, 1999.
- [42] P. Prusiner, M. Sundaralingam, *Acta Crystallogr.* **B32** (1976) 419.
- [43] W. B. Parker *Virus Re.* **107** (2005) 165.
- [44] Moriyama, K., Suzuki, T., Negishi, K., Graci, J.D., Thompson, C.N., Cameron, C.E., Watanabe, M. *J. Med. Chem.* **2008**, *51*, 159–166

Najważniejsze osiągnięcia pracy habilitacyjnej

- Metodą rentgenowskiej analizy strukturalnej, z uwzględnieniem w większości przypadków technik kriokrystalograficznych, określiłam strukturę atomową czternastu wcześniej nie zbadanych kryształów związków organicznych, ważnych z punktu widzenia chemicznego, biologicznego i medycznego.
- Przeprowadzone badania pozwoliły mi na odkrycie różnych typów wiązań wodorowych występujących w analizowanych kryształach.
- W większości badanych układów stwierdziłam, że wiązania wodorowe odgrywają znaczącą rolę w stabilizowaniu konformacji cząsteczek i mają wpływ na aranżację jednostek strukturalnych w kryształach.
- Odnotowałam przypadki, w których wiązanie wodorowe nie ma dużego wpływu na upakowanie cząsteczek lub jonów w ciele stałym.
- Zaobserwowałam wpływ anionu chlorkowego na rearanżację wiązań wodorowych.
- Rezultaty moich badań stanowią cenne informacje strukturalne, które mogą być wykorzystane w chemii materiałowej, kosmetycznej i biologicznej.

E. Bartoszak-Adamska