

Jacek Waluk  
Instytut Chemii Fizycznej PAN  
Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa

Warszawa, 8.10.2013

Recenzja rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego

Pani dr Joanny Nowickiej-Scheibe

Pani dr Joanna Nowicka-Scheibe ukończyła studia w roku 1981 na Politechnice Szczecińskiej, uzyskując tytuł magistra inżyniera na podstawie pracy *Próby syntezy soli 1,1-dialkilo-2-[2-arylotioetylo]pirolidyniowych*. Od października 1981 jest pracownikiem tej uczelni, noszącej obecnie nazwę Zachodniopomorskiego Uniwersytetu Technologicznego w Szczecinie. Doktorat obroniła w roku 1996 na Uniwersytecie Wrocławskim. Rozprawa nosiła tytuł *Synteza i właściwości kompleksów z wewnątrzcząsteczkowym wiązaniem wodorowym (NHN)<sup>+</sup> i (NHN)<sup>-</sup>*, a promotorem był prof. dr hab. Eugeniusz Grech. Zarówno miejsce obrony, jak i zagadnienia poruszane w pracy doktorskiej – badania tzw. „gąbek protonowych” wynikały z nawiązanej pod koniec lat osiemdziesiątych współpracy z grupą prof. Lucjana Sobczyka, światowego autorytetu w dziedzinie wiązania wodorowego. Kontynuując współpracę z grupą prof. Sobczyka, dr Nowicka-Scheibe zajmowała się syntezą i charakteryzacją wielu układów tworzących ciekawe, nietypowe wiązania wodorowe. Były wśród nich sulfonamidy, pochodne benzochinonu, a także kompleksy z przeniesieniem ładunku. Oprócz powyższych związków, Pani dr Nowicka-Scheibe opracowywała także

syntezy propellanów oraz innych związków, których wspólną cechą strukturalną był brak centrum inwersji (środka symetrii). Od niedawna zajmuje się także syntezą oraz badaniami aktywności przeciwnowotworowej nowych pochodnych pirymidyno-2-tionu i pirydyno-2-tionu.

Na dorobek publikacyjny Pani dr Nowickiej-Scheibe składa się 45 prac, z tego 39 zostało wykonanych po doktoracie. Były one cytowane oko. 300 razy, a indeks h wynosi 11. Pani dr Nowicka-Scheibe jest też współautorką patentu oraz jedynym autorem zgłoszenia patentowego. Lista komunikatów konferencyjnych obejmuje 37 pozycji. Uczestniczyła – jako wykonawca – w czterech grantach KBN-owskich oraz w czterech grantach międzynarodowych. Odbyła krótkoterminowe staże naukowe w Moskwie, w Dubnej i w Garching.

Za swoją działalność naukową była trzykrotnie wyróżniana nagrodą indywidualną III stopnia Rektora Zachodniopomorskiego Uniwersytetu Technologicznego w Szczecinie (2003, 2010, 2011); otrzymała także Medal Złoty za Długoletnią Służbę.

Działalność dydaktyczna obejmuje zajęcia dla studentów Wydziału Technologii i Inżynierii Chemicznej. Są wśród nich wykłady oraz ćwiczenia laboratoryjne i audytoryjne z chemii organicznej. Prowadziła również zajęcia na Podyplomowym Studium dla Nauczycieli oraz zajęcia promocyjne dla uczniów szkół średnich.

Pani dr Nowicka-Scheibe uczestniczyła w organizacji dwóch konferencji naukowych. Jest członkiem Zarządu Oddziału Szczecińskiego Polskiego Towarzystwa Chemicznego.

## Ocena rozprawy habilitacyjnej

Na rozprawę, nazwaną *Synteza i badania związków organicznych o potencjalnych właściwościach optycznie nieliniowych* składa się seria trzynastu publikacji wykonanych pomiędzy 2003 a 2012 r. oraz jedno zgłoszenie patentowe. Dwie z powyższych prac ukazały się w *Polish Journal of Chemistry*, a reszta w renomowanych czasopismach zagranicznych (*J. Chem. Phys.*, *Chem. Phys.*, *J. Mol. Struct.*). Pani dr Nowicka-Scheibe jest pierwszym autorem w ośmiu z nich, a w dwóch autorem–korespondentem. Ta ostatnia liczba może wzbudzać pewien niepokój, ale trochę go rozwiewają dołączone do rozprawy odpowiednie oświadczenia współautorów. Wynika z nich jasno rola pełniona przez dr Nowicką-Scheibe we wszystkich publikacjach: była ona twórcą badanych związków, brała również aktywny udział w ich charakteryzacji fizyko-chemicznej.

Zarówno w tytule rozprawy, jak i w autoreferacie, autorka kładzie duży nacisk na możliwość zastosowania zsyntetyzowanych przez nią układów w optyce nieliniowej. Z drugiej strony, mówi się o „potencjalnych możliwościach”, natomiast brakuje informacji odnośnie wykonanych dotąd badań w tym obszarze. Dlatego też uważam, że tytuł rozprawy sformułowany został trochę „na wyrost”, jako próba znalezienia „wspólnego mianownika” dla wszystkich prac. Sądzę, że takich „wspólnych mianowników”, bardziej adekwatnych do rezultatów przedstawionych w rozprawie jest kilka. Pierwszy to osiągnięcia syntetyczne: autorka uzyskała szereg nowych związków z grupy propellanów. Ciekawym wynikiem okazało się wykazanie, że reakcja między 1,2-cykloheksanodionem i N,O-dinukleofilem prowadzi do innego produktu niż oczekiwany propellan. Niespodzianką był również wynik reakcji *o*-aminofenoli z bicyklicznym 1,2-diketonem - D,L-kamforochinonem (w obecności powietrza). Analiza reakcji doprowadziła do zaproponowania rzadkiego mechanizmu



rozerwania wiązania C-C dwóch grup karbonylowych. Mechanizm ten nie był uprzednio opisany w literaturze. Stał się więc przedmiotem zgłoszenia patentowego.

Drugim „wspólnym mianownikiem” dla znakomitej większości publikacji składających się na rozprawę, jest otrzymanie i wnikliwe zbadanie własności szeregu cząsteczek i kompleksów istotnych z punktu widzenia zrozumienia istoty międzycząsteczkowych wiązań wodorowych, dynamiki ruchu protonów w takich wiązaniach, przenoszenia protonu, czy też roli wiązań wodorowych w strukturze kryształu. Pokrewnym, choć odmiennym zagadnieniem było zbadanie potencjału rotacji grup metylowych w kompleksach z wiązaniami wodorowymi i z przeniesieniem ładunku (CT). Zwłaszcza wyniki badań tych ostatnich wydają mi się szczególnie interesujące. Autorka użyła rozmaitych akceptorów ładunku: 7,7,8,8-tetracyjanochinodimetanu (TCNQ), tetracyjanoetyleny (TCNE), kwasu chloranilowego (2,5-dichloro-3,6-dihydrokso-*p*-benzochinonu) oraz kwasu kwadratowego - 3,4-dihydrokso-cyklobut-3-en-1,2-dionu. Z kolei jako donorów elektronów  $\pi$  użyto heksametylobenzen, 2,3,5,6-tetrametylopirazyne, 2,5- i 2,6-dimetylopirazyny, a także 4,4'-,5,5'- i 6,6'-dimetylo- i 4,4'-di-*t*-butylo-2,2'-bipirydyny. Kompleksy te poddano gruntownym badaniom: rentgenograficznym, neutronograficznym, spektroskopowym, kalorymetrycznym. Użyto też technik chemii kwantowej. Warto podkreślić występowanie w tego typu układach zarówno bardzo silnych (OH $\cdots$ O, NH $\cdots$ O, OH $\cdots$ N), jak i bardzo słabych (CH $\cdots$ O, CH $\cdots$ N) wiązań wodorowych. Wykazano ważną rolę tych ostatnich w tworzeniu struktury krystalicznej. Jeszcze ciekawsze, a także nowatorskie okazały się badania wpływu międzycząsteczkowych wiązań wodorowych oraz procesów przenoszenia ładunku w kompleksach na rotację grup metylowych. Dla przykładu, w kompleksie heksametylobenzenu z 7,7,8,8-tetracyjanochinodimetanem o stechiometrii 1:1 wykazano, że rotacja grup metylowych zachodzi łatwiej niż w samym heksametylobenzenu. W innym układzie tego

typu, a mianowicie w kompleksie tetrametylopirazyna:1,2,4,5-tetracyjanobenzen zaobserwowano, przy użyciu metody nieelastycznego rozpraszania neutronów, istotne zmniejszenie częstości drgań torsyjnych grup metylowych, związane z przenoszeniem ładunku elektronowego na część benzenową. Z kolei w kompleksach kwasu chloranilowego z dimetylobipirydydami rolę tego rodzaju oddziaływań uznano za niezbyt istotną.

Powyższe badania w istotny sposób poszerzyły wiedzę na temat międzycząsteczkowych wiązań wodorowych oraz mechanizmów sprzężenia między przeniesieniem ładunku, wiązaniem wodorowym a barierą rotacji grup metylowych. W połączeniu z osiągnięciami syntetycznymi habilitantki, wyniki te pozwalają stwierdzić, że zarówno rozprawa habilitacyjna, jak i dorobek naukowy Pani dr Joanny Nowickiej-Scheibe spełniają zwyczajowe i ustawowe wymogi stawiane habilitantom (art. 16 i 17 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65 poz. 595 ze zm. Dz.U. z 2005 r., nr 164, poz. 1365)). Stawiam wniosek o dopuszczenie Pani dr Joanny Nowickiej-Scheibe do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

  
Jacek Waluk

