



Dr hab. Anna Kozioł, prof. UMCS

Lublin, dnia 27.03.2013

OPINIA

o dorobku naukowym dr Elżbiety Bartoszak-Adamskiej

w związku z postępowaniem o nadanie stopnia naukowego
doktora habilitowanego

Dr Elżbieta Bartoszak-Adamska jest absolwentką i pracownikiem Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Pracę zawodową rozpoczęła w roku 1987 po uzyskaniu stopnia magistra chemii. Pracę magisterską wykonywała pod kierunkiem prof. dr. hab. Mariusza Jaskólskiego, który był również promotorem jej rozprawy doktorskiej. Od roku 1996, po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych, jest zatrudniona jako adiunkt w Zakładzie Krystalografii Wydziału Chemii UAM. Jednocześnie, będąc pracownikiem tego Zakładu, kilkakrotnie w latach 1989-1999 wyjeżdżała na zagraniczne staże naukowe.

Dr Elżbieta Bartoszak-Adamska jest specjalistką w dziedzinie krystalografii i główną metodą stosowaną przez nią w badaniach jest rentgenowska analiza strukturalna, wykorzystująca dyfrakcję promieni rentgenowskich na monokryształach. W większości opublikowanych prac te badania strukturalne połączone są z badaniami spektroskopowymi (IR, ^1H NMR, ^{13}C NMR lub ^{15}N NMR) oraz obliczeniami kwantowo-chemicznymi. Badania prowadzone były we współpracy z grupami badawczymi z Wydziału Chemii UAM (prof. B. Brzezinski, prof. Z. Dega-Szafran, prof. M. Szafran), Politechniki Łódzkiej i CBMiM PAN w Łodzi (prof. G. Bujacz, prof. M. Potrzebowski), z Instytutu Chemii Bioorganicznej PAN w Poznaniu (prof. IChB J. Zeidler) oraz Instytutu Biochemii i Biofizyki PAN w Warszawie (prof. J. Wójcik). W ośrodkach tych wykonywane były syntezy i badania spektroskopowe.

Część z tych badań była finansowana w ramach pięciu grantów, w których dr E. Bartoszak-Adamska była wykonawcą.

Dr Elżbieta Bartoszak-Adamska opublikowała 32 oryginalne prace, a także prezentowała 46 komunikatów naukowych na konferencjach krajowych i międzynarodowych. Wyniki badań (z wyjątkiem trzech prac) ukazały się

drukiem w czasopismach naukowych o dostępie ogólnosiwiatowym, a są to m.in.: *Journal of Molecular Structure*, *Journal of Chemical Society – Faraday Transactions*, *Journal of Physical Organic Chemistry*, *Archiv der Pharmazie*, *ChemPhysChem*, *Polyhedron*, *Journal of Chemical Research* i *Acta Crystallographica Sections B & C*. Czasopisma te osiągnęły IF w granicach 3.5 – 0.5. Podana liczba cytowań tych publikacji – 227.

Tematyka badawcza, podejmowana przez dr Elżbietę Bartoszk-Adamską skupia się wokół oddziaływań niekowalencyjnych w kryształach molekularnych tworzonych przez kilku grup związków organicznych. Szczególną uwagę skupia ona na analizie wiązań wodorowych tworzonych w stanie krystalicznym.

Pod tym też kątem wybrała cykl 14 publikacji, które w autoreferacie załączonym do wniosku o nadanie stopnia objęła wspólnym tytułem „*Wiązania wodorowe a konformacja i aranżacja cząsteczek w kryształach organicznych*”. W opublikowanych w tym cyklu pracach jest ona współautorką, dlatego dokumentacja załączona do wniosku zawiera 38 oświadczeń współautorów o udziałach i zakresach w wykonaniu prac oraz zgody współautorów na wykorzystanie wyników w pracy habilitacyjnej.

Na podkreślenie zasługuje bardzo spójny, a jednocześnie różnorodny, materiał chemiczny będący przedmiotem tego cyklu prac. Umożliwiło to wnikliwą dyskusję otrzymanych wyników. Najistotniejsze problemy jakie rozważała dr Elżbieta Bartoszk-Adamska są następujące:

- rozkład ładunków na atomach donora i akceptora cząsteczek współuczestniczących w wiązaniach wodorowych,
- motywy strukturalne tworzone w sieci krystalicznej oraz ocena możliwości utworzenia różnych typów wiązań wodorowych, w tym także kooperatywnych wiązań wodorowych,
- oceny roli wiązań wodorowych w stabilizowaniu konformacji i aranżacji cząsteczek i jonów w sieci krystalicznej,
- wyjaśnienie wpływu tych wiązań na własności fizykochemiczne kryształu.

W każdej z prac włączonej do cyklu habilitacyjnego zawarte są układy cząsteczkowe zdolne do tworzenia wewnątrz- i/lub międzycząsteczkowych wiązań wodorowych. Pod względem chemicznym są to:

- organiczne związki ‘neutralne’ lub zwitterjony [**H4**, **H14**, **H1**, **H7**],
- kompleksy molekularne [**H11**, **H13**],
- sole amin [**H3**, **H6**, **H8**, **H9**, **H12**],
- addukty/hydraty soli [**H2**, **H5**, **H10**].

Szczegółową analizą strukturalną w badanych układach supramolekularnych zostały objęte wiązania wodorowe typu N-H···X, O-H···X oraz słabe oddziaływania C-H···X. To pozwoliło na stwierdzenie, że kluczową rolę w

przyjęciu i zachowaniu określonej konformacji badanych cząsteczek, jonów i zwitterjonów odgrywają klasyczne wiązania wodorowe. Przykładem jest struktura kationu 1,2-bis(dipropyloaminometylo)benzenu, obecnego w kryształach soli nadchloranowej [**H6**], stabilizowana przez silne wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe $N^+-H\cdots N$ wspomagane ładunkiem dodatnim. Natomiast w sieci krystalicznej, w których nie ma silnych donorów protonu, wzrasta rola nieklasycznych wiązań wodorowych $C-H\cdots X$, i tu przykładem może być dimeryzacja enaminoketonów za pomocą wiązań $C-H\cdots O$ [**H4**].

Inne układy wiązań wodorowych opisane w pozostałych pracach są bardzo różnorodne i obejmują:

- kooperatywne wiązania wewnątrzcząsteczkowe w zwitterjonie $[O-H\cdots O^-\cdots H-N^+]$,
- międzyzwitterjonowe wiązania $[O^-\cdots H-N^+-H\cdots O^-]$,
- wiązania międzyjonowe różnych typów [kationy skoniugowane $O\cdots H\cdots O^-$; kation \cdots anion $N^+-H\cdots Cl^-\cdots H-O$; $C-H\cdots Cl^-$],
 - w tym z udziałem cząsteczek wody $[N-H\cdots O-H\cdots Br^-\cdots H-O-H; O^-\cdots H-O-H\cdots O^-]$.

Szczególnie zwracają uwagę przypadki soli czwartorzędowych amin [**H2**, **H3**, **H5**, **H9**, **H10**], gdzie mogą występować też międzyjonowe oddziaływania elektrostatyczne bez udziału atomów wodoru. Kandydatka analizuje też wpływ anionów na destrukcję spodziewanych motywów ‘klasycznych’ wiązań wodorowych, tworzonych z udziałem grup funkcyjnych zawierających atomy azotu lub tlenu. Opisy struktur układów wiązań wodorowych zawarte w załączonych pracach **H1** – **H14** są dokonane bardzo starannie i przejrzysto, co w połączeniu z analizą danych spektroskopowych i obliczeniami teoretycznymi daje całościowy obraz roli tych oddziaływań niekowalencyjnych.

W pozostałych publikacjach, niezwiązanych do oceny, dr Elżbieta Bartoszak-Adamska opisała syntezę oraz struktury nowych związków organicznych (w tym wykazujących aktywność biologiczną), kompleksów organo-metalicznych oraz faz nieorganicznych.

Oceniając działalność naukową Kandydatki zatrudnionej na etacie pracownika naukowo-dydaktycznego, należy też uwzględnić Jej pracę jako nauczyciela akademickiego.

W ramach obowiązków dydaktycznych prowadziła Ona zajęcia laboratoryjne z krytalografii, krytalchemii, biokrytalografii, rentgenografii na różnych poziomach zaawansowania i dla kilku specjalizacji. W ramach tych przedmiotów nauczała Ona studentów chemii (specjalności podstawowej, kosmetycznej, biologicznej, środowiska) a także biotechnologów, bioinformatyków i biologów molekularnych. Była też zaangażowana w

przygotowanie tych ćwiczeń, co zapewne wykonywała bardzo sumiennie i precyzyjnie (na wyrażenie takiej opinii pozwalają mi moje osobiste obserwacje stylu pracy Kandydatki).

Dr E. Bartoszak-Adamska prowadziła również ćwiczenia laboratoryjne z chemii fizycznej i organicznej oraz opiekowała się magistrantami i stażystami wykonującymi swoje badania w Zakładzie Krystalografii UAM. W ramach zastępowania innych pracowników Zakładu Krystalografii, wyjeżdżających m.in. za granicę, prowadziła wykłady z krystalografii i biokrystalografii. Taka różnorodność przedmiotów jak i wersje dostosowywanych do różnych specjalności studiów pochłania wiele czasu, a wymiar zajęć (210 - 330 godzin dydaktycznych w roku akademickim) jest również dużym obciążeniem niepozwalającym na pełne zaangażowanie się jedynie w badania naukowe.

Kandydatka bierze aktywny udział w pracach organizacyjnych komitetów przygotowujących konferencje naukowe i spotkania studenckich sesji naukowych. Prowadzi też zajęcia zarówno w ramach popularyzatorskich *Drzwi Otwarte*, jak i na *Uniwersytecie Trzeciego Wieku*.

Posumowanie recenzji

Dr Elżbieta Bartoszak-Adamska we wniosku o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego przedstawiła cykl 14 publikacji, których tematykę badań scaliła tytułem „*Wiązania wodorowe a konformacja i aranżacja cząsteczek w kryształach organicznych*”. Jej całociowy dorobek naukowy nie jest zbyt obfity – są to 32 publikacje, tym 26 po uzyskaniu stopnia doktora. Tym niemniej prace pod względem rzetelności metodyki badań i wagi omawianych problemów należy ocenić jako dobre. Pozytywnie trzeba ocenić inne aspekty Jej działalności akademickiej, a przede wszystkim pracę doświadczonego nauczyciela i organizatora.

Zbiór prac i dokumentów przedstawiony mi do oceny spełnia wymagania stawiane przez Ustawę z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (art. 13). Zwracam się z prośbą o dopuszczenie dr Elżbiety Bartoszak-Adamskiej do dalszych etapów postępowania w procedurze o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

.....
/Anna E. Koziół/