



DEPARTMENT OF CHEMISTRY

UNIVERSITY OF WARSAW

L. Pasteura 1, 02093 Warsaw, POLAND

Prof. Dr hab. Dr h.c. Tadeusz Marek Krygowski

Opinia o rozprawie habilitacyjnej dr Elżbiety Bartoszak - Adamskiej pt.:

„Wiązania wodorowe a konformacja i aranżacja cząsteczek w kryształach organicznych”

oraz o Jej dorobku naukowym, dydaktycznym i organizacyjnym.

Dr Elżbieta Bartoszak - Adamska ukończyła studia chemiczne na Wydziale Chemii Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu w roku 1987 i tam obroniła w roku 1996 tezę doktorską pt.: „Badania strukturalne soli diamin alifatycznych i aromatycznych” na podstawie prac wykonanych pod kierunkiem prof. dr hab. Mariusza Jaskólskiego. Od roku 1996 pracuje na tym Wydziale jako adiunkt.

Rozprawa habilitacyjna dr Elżbiety Bartoszak - Adamskiej dotyczy zawsze aktualnej tematyki badawczej – wiązań wodorowych i ich konsekwencji w odniesieniu do struktury kryształu. Tematyka ta jest wszechstronnie rozwijana w środowisku naukowym wydziału chemii UAM.

Dane scjencjometryczne

Dr Elżbieta Bartoszak - Adamska opublikowała 29 prac z tzw. listy filadelfijskiej w tym 23 prace po doktoracie. Jest to przyzwoity wynik, a prace ukazywały się w czasopismach o światowym obiegu takich jak: *Acta Cyst B*, *J. Chem. Soc. Farad. Trans.*, *J. Mol. Struct.*, *Polyhedron*, *PhysChemPhys*, *J. Phys.*

Org. Chem., i inne. Sumaryczny IF wynosi 46.1, co w przeliczeniu na jedną publikację daje dosyć przeciętny wynik 1.59. Liczba cytowań wynosi 243 a bez autocytowań 227, co jest dobrym wynikiem. Indeks Hirscha wynosi 9. Reasumując, dane scjencjometryczne dr. Bartoszak – Adamskiej spełniają zwyczajowo przyjęte normy dla habilitacji.

Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego

Zainteresowania naukowe Habilitantki dotyczą głównie relacji między występowaniem wiązań wodorowych w kryształach związków organicznych a konformacją i aranżacją cząsteczek badanych głównie metodami rentgenowskiej analizy strukturalnej. Na rozprawę składa się 14 publikacji wieloautorskich (od 3 do 7 autorów) i w żadnej publikacji dr Bartoszak nie jest autorem korespondencyjnym, chociaż w połowie prac jest Ona pierwszym autorem. Jej udział w opracowaniu publikacji (wg Jej oceny) wynosi nieco ponad 40%.. Z pewnym zażenowaniem zauważyłem, że w pięciu publikacjach w *J. Mol. Struct.* nie było konkluzji.

Obiektami badań Habilitantki były zarówno kryształy molekularne związków organicznych jak i kryształy jonowe a dane krystalograficzne były uzupełniane badaniami spektroskopowymi (głównie IR oraz NMR). Rozmaitość występowania różnych oddziaływań dawała Habilitantce możliwość znalezienia ciekawych obserwacji i ich interpretacji. Niestety, dotyczyły one na ogół poszczególnych układów i trudno zauważyć istotne wnioski ogólne, wykraczające poza dosyć trywialne stwierdzenia (str. 44 autoreferatu): „... badania pozwoliły na odkrycie różnych typów wiązań wodorowych...” albo, że „...wiązania wodorowe odgrywają znaczącą rolę w stabilizowaniu konformacji cząsteczek i mają wpływ na aranżację jednostek strukturalnych w kryształach.” Ciekawa jest obserwacja, zanotowana ogólnikowo jako jeden z wniosków, że obecność w sieci jonów chlorkowych powoduje zmniejszenie roli wiązań wodorowych na upakowanie

cząsteczek i ich aranżację w sieci kryształu. Aż się prosiło, aby temat ten drążyć przy pomocy danych zebranych w Cambridge Structural Database. Chociaż wiele wyników przedstawionych w dorobku habilitacyjnym dr E. Bartoszak – Adamskiej jest interesujące ze względu na badane układy, ale brakuje mi głębszej ich analizy strukturalnej. Nie mam wątpliwości, że Habilitantka jest krystalografem o dużym doświadczeniu i umiejętnościach badawczych w zakresie rentgenowskiej analizy strukturalnej, o czym wnioskuję na podstawie złożoności badanych struktur i ich rozmiarach.

Oprócz publikacji wchodzących w skład habilitacji należy wspomnieć o dorobku publikacyjnym niewłączonym do rozprawy. Jest to 15 prac, z których w dziesięciu jest dr Bartoszak pierwszym autorem. Są to prace dotyczące głównie badań strukturalnych – widać wszechstronność tematyczną dotyczącą badań bardzo zróżnicowanych układów. Warto zauważyć znaczący udział Habilitantki w tych publikacjach(ponad 50%).

Nie mam wątpliwości, że dr Bartoszak – Adamska posiada znaczące umiejętności kooperacyjne, o czym świadczy liczba współpracowników – znanych naukowców w różnych dziedzinach badawczych zarówno w kraju (12) jak i zagranicą (7). Uczestniczyła Ona w kilku grantach badawczych MEN (1990 – 92) oraz KBN (1999 – 2002), KBN (2000 – 03) i KBN (2003 – 04). W ramach programu Sokrates-Erasmus uczestniczyła także w organizacji kursów „Bioinformatics and Structural Genomics”, które w latach 2004, 2005, 2011 odbywały się na uczelniach w Poznaniu. Pracowała również w komitetach organizacyjnych konferencji międzynarodowych „Symposium on Organic Crystal Chemistry” w Rydzynie (1992, 1994, 1997, 2001) oraz krajowych „Kryształy Organiczne” ,Poznań 1998, a także organizowała konferencje studenckie w latach 2006 – 12.

Dr Bartoszak – Adamska ma spory dorobek dydaktyczny: opieka nad magisteriatami, stażystami krajowymi (5) i zagranicznymi (4) prowadziła zajęcia

laboratoryjne z biokrytalografii, z chemii fizycznej, zajęcia specjalistyczne z rentgenografii i inne. Habilitantka prowadziła także działalność popularyzatorską.

Za działalność naukową, dydaktyczną i organizacyjną Habilitantka została wyróżniona nagrodą JM Rektora UAM II stopnia.

Reasumując stwierdzam, że dr E. Bartoszak – Adamska jest dobrym specjalistą w zakresie strukturalnej analizy rentgenowskiej. Jednak, jak wynika z wcześniej przedstawionych uwag na podstawie obecnie przedłożonej rozprawy (autoreferat i zbiór 14 publikacji) nie widzę podstaw do pozytywnej konkluzji mojej recenzji. W tej sytuacji proponuję skorzystanie z możliwości jaką daje aktualnie obowiązująca ustawa o stopniach i tytule naukowym, konkretnie z art. 18a pkt 10 stanowiącego: "...w szczególnych przypadkach, uzasadnionych wątpliwościami komisji habilitacyjnej dotyczącymi dokumentacji osiągnięć naukowych, komisja może przeprowadzić z wnioskodawcą rozmowę o jego osiągnięciach i planach naukowych". Przypadek uważam za szczególny, jak uzasadniłem w recenzji.

Podsumowując proponuję Komisji podjęcie decyzji po wysłuchaniu Kandydatki.

Warszawa, 26. III. 2013....

T. M. Krygowski