

Prof. dr hab. Krzysztof Bobrowski
Instytut Chemii i Techniki Jądrowej
Dorodna 16, 03-195 Warszawa
E-mail: k.bobrowski@ichtj.waw.pl



**Recenzja osiągnięcia naukowego (rozprawy habilitacyjnej)
oraz dorobku naukowego i aktywności naukowej**

Dr JOANNY EWY RODE

**w związku z postępowaniem habilitacyjnym w dziedzinie nauk chemicznych
prowadzonym w Instytucie Chemii i Techniki Jądrowej w Warszawie**

Niniejsza recenzja na którą składa się ocena osiągnięcia naukowego, całościowego dorobku naukowego kandydatki (ze szczególnym uwzględnieniem okresu po uzyskaniu stopnia doktora), jej aktywności w pozyskiwaniu środków finansowych na badania, prowadzonej współpracy naukowej, oraz działalności dydaktycznej, popularyzatorskiej i organizacyjnej została przygotowana w oparciu o dostarczone materiały na które składają się m.in. (i) autoreferat w języku polskim i angielskim zawierający opis osiągnięcia naukowego i pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych, (ii) wykaz dorobku naukowego, (iii) oświadczenia współautorów publikacji naukowych (iv) wraz z ich kopiami, które stanowią podstawę osiągnięcia naukowego. Recenzja ta ma odpowiedzieć na pytanie czy dr Joanna Ewa Rode spełnia wymagania określone w *Ustawie z dnia 14 marca 2003 o stopniach naukowych i tytule naukowym wraz z późniejszymi zmianami*, a zatem czy ma w swoim dorobku osiągnięcia naukowe po uzyskaniu stopnia doktora, które stanowi istotny Jej wkład w rozwój określonej dyscypliny naukowej oraz czy wykazuje się jednocześnie znaczącym dorobkiem i aktywnością naukową.

Osiągnięcie naukowe. Przedstawione do recenzji osiągnięcie naukowe „*Oddziaływania międzymolekularne monitorowane za pomocą spektroskopii oscylacyjnego dichroizmu kołowego*” stanowiące podstawę ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych dr Joanny Ewy Rode, adiunkta zatrudnionego w Instytucie Chemii i Techniki Jądrowej oraz Instytucie Chemii Organicznej PAN, zostało przygotowane zgodnie z przepisami opublikowanymi w postaci zmian w Dz.U. z 2011 r. Nr 84, poz. 455 – tzw. *nowa habilitacja* i obowiązującymi od 1 października 2011 roku. **Osiągnięcie naukowe** stanowi monotematyczny **cykl 9 oryginalnych publikacji oraz 2 publikacji o charakterze przeglądowym** opublikowanych w latach 2007-2018, które zostały omówione w autoreferacie (w wersji polskiej i angielskiej) w postaci rozszerzonego komentarza autorskiego liczącego 27 stron.

Osiągnięcie naukowe obejmuje swoim zakresem wyniki 10-letniej pracy badawczej habilitantki związanej z badaniem oddziaływań międzycząsteczkowych metodami chiralooptycznymi i próbie interpretacji i wyjaśnienia otrzymanych wyników za pomocą obliczeniowych metod chemii kwantowej. Nie mam wątpliwości, że zarówno zainteresowania naukowe prof. Jana Dobrowolskiego (promotora rozprawy doktorskiej habilitantki) jak i prof. Joanny Sadlej (promotora pracy magisterskiej habilitantki), uznanych autorytetów w tej dziedzinie, jak również możliwość późniejszej z Nimi współpracy miały

istotny, a może nawet decydujący wpływ na ukształtowanie się zainteresowań badawczych habilitantki, co zdecydowało o wyborze tematyki, zrealizowanej i udokumentowanej w przedstawionym do oceny osiągnięciu naukowym. Moją pewną obawę budzi jednak fakt, że promotorzy Jej rozprawy doktorskiej i magisterskiej są współautorami odpowiednio 10 i 6 prac wchodzących w skład „osiągnięcia naukowego”. Wynika to zapewne z faktu, że habilitantka pracowała i nadal pracuje w tej samej grupie badawczej, co promotor rozprawy doktorskiej, jak również z Jego wieloletniej współpracy z prof. Joanną Sadlej i czego konsekwencją było zrealizowanie niektórych badań wchodzących w skład osiągnięcia naukowego w ramach projektów przez Nich kierowanych. Do tej sprawy wrócę jeszcze w dalszym fragmencie mojej recenzji.

Na wstępie chcę podkreślić, że **osiągnięcie naukowe dotyczy tematyki badawczej o bardzo dużym znaczeniu poznawczym, ciągle aktualnej i z dużymi perspektywami pełniejszego wyjaśnienia** charakteru oddziaływań pomiędzy cząsteczkami chiralnymi i niechiralnymi (o czym w sposób klarowny i bardzo konkretny informuje habilitantka w końcowym podrozdziale „Plany badawcze”). Nie można również zapomnieć, że wspomniana tematyka wiąże się z zagadnieniami o dużym **znaczeniu aplikacyjnym**, m.in. w przemyśle farmaceutycznym w kwestii określania konfiguracji absolutnej związków bioaktywnych, z których większość jest chiralna. Przykładem nie docenienia faktu, że enancjomery tego samego związku nie tylko mogą wykazywać całkowicie odmienne właściwości farmakokinetyczne i farmakodynamiczne, ale również mogą różnić się znacząco profilem toksyczności, jest głośna sprawa (z lat 60-tych ubiegłego wieku) związana z lekiem pod nazwą *thalidomid*. Lek ten podawano w postaci racematu, nie zdając sobie wtedy sprawy, że jeden z enancjomerów (o konfiguracji absolutnej *R*) ma działanie lecznicze, a drugi (o konfiguracji absolutnej *S*) jest silnym teratogenem działającym na DNA płodu. Co więcej, nawet po opracowaniu tzw. syntezy asymetrycznej prowadzącej do otrzymania enancjomeru o działaniu leczniczym, okazało się, że związek ten ulega stopniowej racemizacji *in vivo*.

Przedstawione **osiągnięcie naukowe** opiera się, jak już wspomniałem wyżej, na **9 oryginalnych publikacjach** naukowych opublikowanych w **renomowanych czasopismach naukowych o stosunkowo wysokich współczynnikach oddziaływania** (IF) (IF < 1,834 – 3,885): *ChemPhysChem* (2), *PhysChemChemPhys* (1), *Journal of Physical Chemistry A* (3), *Journal of Physical Chemistry B* (1), *Chirality* (1), *i J. Molec. Spectrosc.* (1) oraz **2 publikacjach przeglądowych** w *Chem. Soc. Rev.* (1) (IF = 26,586) i w monografii pod redakcją J. Leszczyńskiego i M. K. Shuklę wydanej przez Springer Science+Business Media. Na tym etapie nie jest moją intencją dokonywać ponownej szczegółowej oceny merytorycznej w/w prac, ponieważ wcześniej były ocenione przez powołanych w tym celu recenzentów, przed ich zaakceptowaniem do publikacji. Sądząc po randze czasopism oraz wydawnictwa musiały być poddane wnikliwym i profesjonalnym recenzjom. Z kolei powinienem wyrazić swoją opinię co do tego, czy wszystkie te publikacje można przypisać inicjatywie i pomysłowości habilitantki.

Prace wchodzące w skład osiągnięcia naukowego były pracami współautorskimi: **1** praca przy współudziale **1** autora (**H3**), **3** prace przy współudziale **2** autorów (**H5, H6 i H7**), **3** prace przy współudziale **3** autorów (**H2, H4 i H11**), **1** praca przy współudziale **4** autorów (**H1**), **1** praca przy współudziale **5** autorów (**H9**) oraz **2** prace przy współudziale **6** autorów (**H8 i H11**). Habilitantka była wymieniona **jako pierwszy autor** i jednocześnie wyznaczona jako **autor do korespondencji w 7 pracach (H3, H4 i H7 - H11)**. Bez wątplenia, świadczy to o **wiodącej roli habilitantki w ich powstaniu**, a oświadczenia współautorów potwierdzają taki obraz. Co więcej, prace **H3, H4 i H7**, były wykonane w ramach pierwszego projektu NCN

kierowanego przez habilitantkę. W tym miejscu wyrażam zdziwienie, że żadna z publikacji wchodząca w skład osiągnięcia naukowego nie została wykonana w ramach drugiego projektu NCN (realizowanego od roku 2015), którego habilitantka jest kierownikiem i którego tytuł wyraźnie wskazuje na powiązanie z tematyką zrealizowaną w ramach w/w osiągnięcia. W pozostałych 4 pracach autorem korespondentem była 3-krotnie prof. Joanna Sadlej (H2, H5 i H6) oraz prof. Jan Dobrowolski (H1). Określenie procentowego udziału własnego jest i będzie zawsze subiektywne bo praktycznie nie można ocenić w procentach wkładu pracy eksperymentalnej, obliczeniowej, redakcyjnej i porównać z wkładem koncepcyjnym. Bardzo dobrze, jeżeli następuje on na zasadzie zgodnego stanowiska wszystkich autorów i według mnie ma to miejsce w tym konkretnym przypadku. Jeśli więc nie mam żadnych wątpliwości (w oparciu o oświadczenia współautorów, potwierdzające przeważający udział dr. Rode w ich powstanie) co do włączenia do swojego osiągnięcia naukowego 7 publikacji (H3, H4 i H7 – H11), to moje wątpliwości budzi po pierwsze włączenie dwóch publikacji wieloautorskich (H1 i H2), w powstanie których udział habilitantki został oceniony jedynie na 20%/25%, i w których nie jest również wymieniona jako pierwszy autor, ani autor korespondencyjny. Fakt ten nie wskazuje na inicjującą i wiodącą rolę habilitantki w ich powstanie, co jest istotne skoro publikacje te mają być uznane jako fragment Jej osiągnięcia naukowego. Potwierdzają to własne oświadczenia habilitantki oraz fakt, że sam problem badawczy musiał być sformułowany wcześniej przez jednego ze współautorów, który był jednocześnie kierownikiem projektu badawczego, w ramach którego powstały obie prace. Kolejne wątpliwości, chociaż z innego powodu, mam z włączeniem do osiągnięcia naukowego dwóch prac przeglądowych (H5 i H6). Niezależnie od faktu, że cały ciężar dokonania przeglądu literaturowego spoczywał na habilitantce, a udział współautorów sprowadził się do napisania odpowiednich fragmentów publikacji i uczestnictwie w jego redakcji, to obie publikacje stanowią przegląd istniejącej wiedzy odnośnie wykorzystania spektroskopii oscylacyjnego dichroizmu kołowego do badania oddziaływań międzycząsteczkowych z udziałem cząsteczek chiralnych, a nie realny wkład dr Joanny Rode w rozwój tej wiedzy. Są to bardzo wartościowe publikacje przeglądowe pokazujące szerokie i nowe możliwości w/w techniki, jednak nie są one oparte na oryginalnych osiągnięciach habilitantki. Oczywiście nie umniejsza to włożonego ogromnego nakładu pracy w ich powstanie i które bez wątpienia pomogły sformułować habilitantce cele badawcze „osiągnięcia naukowego”. Sam fakt obecności pracy przeglądowej w „osiągnięciu naukowym” jest całkowicie do zaakceptowania, ale w tym przypadku bardziej na miejscu byłaby praca przeglądowa dotycząca własnego osiągnięcia naukowego habilitantki i jednocześnie prezentująca je na tle aktualnego stanu wiedzy. We wspomnianych pracach przeglądowych (H5 i H6) habilitantka przedstawiła wprawdzie wyniki publikacji H1, H2 i H4 na tle wyników innych grup badawczych, ale w praktyce dotyczy to tylko wyników uzyskanych w publikacji H4, które można bez żadnych wątpliwości przypisać inicjatywie koncepcyjnej habilitantki.

Te w/w fakty w niczym nie obniżają **mojej bardzo wysokiej oceny osiągnięcia naukowego** (w oparciu o 7 pozostałych publikacji), które stanowi znaczący wkład w poznanie oddziaływań międzycząsteczkowych badanych metodami chiralnooptycznymi, a w szczególności spektroskopią oscylacyjnego dichroizmu kołowego i wykorzystania do realizacji tego celu metod obliczeniowej chemii kwantowej służących do interpretacji i symulacji widm chiralnooptycznych.

Krótkie tło historyczne związane z pojęciem chiralności, charakterystyce i znaczeniu cząsteczek chiralnych oraz rodzajem technik chiralooptycznych zostało omówione przez habilitantkę w podrozdziale *Wprowadzenie/Introduction*.

Cel osiągnięcia naukowego wraz z aspektami motywacyjnymi którymi kierowała się habilitantka w podjęciu badań stanowiących jego podstawę można krótko podsumować następująco:

Dokonany pod koniec ubiegłego stulecia olbrzymi postęp w aparaturze dostępnej komercyjnie i umożliwiającej pomiary techniką spektroskopii oscylacyjnego dichroizmu (VCD) oraz możliwość rutynowych obliczeń widm chiralooptycznych wykorzystując dostępne programy (np. Gaussian 98) skłonił habilitantkę do podjęcia się trudnego i wymagającego dużej wiedzy i doświadczenia wyzwania (sformułowanego w postaci trzech zasadniczych celów „osiągnięcia naukowego”) związanego z oddziaływaniami międzycząsteczkowymi badanymi spektroskopią VCD wykorzystując do tego celu metody obliczeniowe chemii kwantowej. Pierwszym z nich było rozwinięcie idei „transferu chiralności” zawartej w jednej z 7 publikacji z roku 2003 i ujętej w jej rozprawie doktorskiej i która jak pisze sama habilitantka „stała się inspiracją do dalszych badań tego zjawiska”. Co więcej, w tym samym czasie tymi zagadnieniami zainteresowały się inne zespoły badawcze, a pierwsza praca związana z transferem chiralności badanym techniką VCD ukazała się w roku 2002, po której zaczęły ukazywać się kolejne publikacje innych zespołów, włączając krajowe (swój udział miała też habilitantka) w których pokazano, że transfer chiralności zachodzi w układach z wiązaniem wodorowym, ale pytanie czy istnieją inne układy w których takie zjawisko może mieć miejsce pozostawało otwarte. Była więc to tematyka nowa i ciągle dająca możliwości „nowych odkryć”. Kolejne cele, których realizacji podjęła się habilitantka, to określenie wpływu konformacji, stanu skupienia i środowiska na parametry widm chiralooptycznych oraz ich analiza w oparciu o widma symulujące wykorzystujące analizę konformacyjną oraz różne metody obliczeniowe, bazy funkcyjne, sposoby symulacji rozpuszczalnika i modelowania ciała stałego.

Za najważniejsze dokonania dr Joanny Ewy Rode uzyskane w **osiągnięciu naukowym**, uważam:

(i) w zagadnieniach związanych z transferem chiralności

• **wykazanie, w oparciu o metody obliczeniowe, że tzw. „transfer chiralności” w kompleksach stabilizowanych poprzez oddziaływania elektronowe donorowo-akceptorowe może być obserwowany w widmach VCD (H3 i H4).**

W pracy **H3** pokazano, że na podstawie obliczonych widm VCD kompleksu EDA sulfiniminy $\cdots \text{BF}_3$ (wytypowanego przez habilitantkę) można w cząsteczce sulfiniminy wykluczyć atom S jako jedno z trzech możliwych miejsc kompleksowania z cząsteczką BF_3 . Z kolei, najbardziej charakterystyczne pasma VCD są związane z czterema modami transferu chiralności w BF_3 i mogą świadczyć o obecności kompleksu typu N- BF_3 i/lub O- BF_3 . Na podstawie przeprowadzonej analizy wiarygodności otrzymanych pasm VCD w oparciu o istniejące kryteria habilitantka wyciągnęła dwa ważne wnioski: (i) braku uniwersalnego kryterium badania wiarygodności pasm transferu chiralności oraz (ii) do uznania czy dane pasmo transferu chiralności jest wiarygodne czy nie, konieczne jest określenie wpływu kształtu powierzchni energii potencjalnej na intensywność VCD tego pasma.

W pracy **H4**, pokazano, że na podstawie obliczonych widm VCD stosunkowo silnego kompleksu EDA chinina $\cdots \text{BF}_3$ (również wytypowanego przez habilitantkę), najsilniejszy

kompleks tworzy najstabilniejszy konformer, w którym cząsteczka BF_3 oddziałuje z chininą poprzez trzeciorzędowy atom azotu alifatycznego pierścienia chinuklidynowego, który powinien być łatwo rozpoznawalny w widmie VCD. Przeprowadzona analiza wiarygodności pasm wskazywała, że jedno z tych pasm powinno być pasmem wiarygodnym i może być wykorzystywane do obserwacji zjawiska transferu chiralności. Habilitantka pokazała, że w widmach VCD silnie oddziałujących kompleksów EDA powinna być możliwa obserwacja zjawiska transferu chiralności, a pasma spełniające kryterium wiarygodności mogą pełnić funkcje diagnostyczną tego zjawiska. Na podkreślenie zasługuje fakt, że idea prac obliczeniowych habilitantki zawartych w w/w pracach została już wykorzystana w późniejszych pracach eksperymentalnych innej grupy badawczej związanych z kompleksami chiralnej aminy z borowodorem i wykorzystującej spektroskopię VCD.

(ii) W zagadnieniach związanych z wpływem konformacji, środowiska i stanu skupienia na widma chiralnoptyczne:

- **otrzymanie na drodze symulacji widm VCD i IR metioniny (L-Met) (jednego z ważniejszych aminokwasów występujących w białkach i pełniącego wiele ról w układach biologicznych) w fazie gazowej i roztworach wodnych w oparciu o szczegółową analizę konformacyjną tej cząsteczki, które skonfrontowano z dostępnymi w niektórych przypadkach widmami otrzymanymi eksperymentalnie (H7).** Uzyskane wyniki z całą pewnością będą pomocne w interpretacji eksperymentalnych widm VCD i IR L-metioniny w formie obojętnej jak i zwitterjonowej. Ciekawą informację stanowi dla mnie obecność w zwitterjonowej formie L-Met konformerów stabilizowanych wewnątrzcząsteczkowymi wiązaniami wodorowymi $\text{NH}\cdots\text{S}$, co może wyjaśniać niektóre procesy rodnikowe oraz obecność produktów podczas jedno-elektronowego utlenienia tego aminokwasu,

- **wykazanie, że rozpuszczalnik (środowisko) oraz faza (stan skupienia) mają bezpośredni wpływ na konformację tiofenosulfonamidu (TSA) i tertiofenosulfonamidu (TTS), co jest kluczowe podczas interpretacji widm chiralnoptycznych (H8 i H9).** Ciekawą obserwacją było zarejestrowanie dwóch różnych widm chiralnoptycznych tego samego enancjomeru TSA w dwóch różnych stanach skupienia, które wyglądały jak widma dwóch różnych enancjomerów. Habilitantka wskazała na przyczyny tego zjawiska oraz zaproponowała podejście metodologiczne wiarygodnego przewidywania widm VCD w przypadku bardzo niskich barier energetycznych pomiędzy konformerami. Model w którym wszystkie konformery wnoszą równy wkład populacyjny do widm wydaje się najlepiej odtwarzać widma eksperymentalne (H8). Widma VCD i ECD chiralnych tiofenosulfonamidu i tertiofenosulfonamidu zależą ponadto od chiralności atomu azotu, wielkości podstawnika przy atomie C6, rotacja pierścienia tiofenu to kolejne ważne wnioski wynikające z prac H8 i H9,

- **zaproponowanie (na przykładzie podstawionych izoindolinonów) podejścia obliczeniowego pozwalającego odtworzyć eksperymentalne widma VCD w fazie stałej (H10), które jak się okazało zależało od przypuszczalnej struktury klastra cząsteczkowego (większy klaster, lepsza zgodność z eksperymentem), rodzaju podstawnika, bazy obliczeniowej i użycia poprawek na dyspersję układu. Jest to bardzo duże wyzwanie, bo nie ma jednolitego podejścia umożliwiającego odtworzenie wszystkich widm eksperymentalnych w fazie krystalicznej,**

- **wykazanie, że rotacja grupy OH przy węglu C6 w układach chromanowych ma wpływ na właściwości chiralnoptyczne, co jednocześnie dowodzi, że empiryczna reguła**

helikalności stosowana do **przypisywania konfiguracji absolutnej układów chromanowych** powinna być stosowana z dużą ostrożnością (H11).

Dorobek naukowy. Analiza aktywności naukowej dr Joanny Ewy Rode począwszy od pracy magisterskiej wykonanej w 1999 roku na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego (UW), poprzez rozprawę doktorską „*The [2+2] cycloaddition reactions of cumulenes, as well as interactions and molecular spectra of four-membered ring molecules*” wykonaną w Instytucie Chemii Przemysłowej im. prof. I. Mościckiego w Warszawie, której promotorem był prof. dr hab. Jan Cz. Dobrowolski i obronioną przed Radą Wydziału Chemii UW w 2006 roku (i wyróżnioną), do przygotowanego po kolejnych 13 latach w marcu 2019 roku osiągnięcia naukowego, które stanowi podstawę ubiegania się o stopień doktora habilitowanego pokazuje systematyczny rozwój naukowy habilitantki.

Dorobek naukowy habilitantki jest zawarty w **50 publikacjach opublikowanych w czasopismach naukowych ujętych w bazie „Journal of Citation Reports”** o szerokim zasięgu międzynarodowym w tym **19** przed uzyskaniem stopnia doktora (poz. M1, poz. D1-D7, ND1-ND11) i **31** po uzyskaniu stopnia doktora (poz. NH1- NH21 i włączając prace wchodzące w skład osiągnięcia naukowego (poz. H1-H5 i H7-H11). Sumaryczny *Impact Factor* (IF) czasopism w których opublikowane wszystkie prace naukowe według listy *Journal Citations Reports* (JCR) wynosi **146.04**, co w prostym przeliczeniu na 50 publikacji daje średni IF ≈ 2.9 przypadający na czasopismo. Aktualna całkowita liczba cytowań publikacji wynosi 644 (bez autocytowań wynosi **554**) (podana przez habilitantkę według bazy Web of Science, dane z marca 2019) a Indeks *Hirscha* (*H*) wynosi **15**. Jest to **bardzo przyzwoity i solidny dorobek naukowy** jak na uzyskany przez blisko **20 lat pracy naukowej** (przyjmując za jej początek rok podjęcia pracy w IChP), średnio są to blisko **3 publikacje na rok**. Nie można też pominąć faktu, że tematyka badawcza habilitantki jest dość wąska i dotyczy dość specjalistycznych zagadnień, co siłą rzeczy znacznie ogranicza liczbę cytowań i w konsekwencji indeks *H*. Z tego powodu nie przykładałbym zbyt wielkiego znaczenia do oceny osiągnięć habilitantki za pomocą tylko parametrów bibliometrycznych. W pierwszym rzędzie w ocenie dorobku naukowego powinno się oceniać **poziom merytoryczny publikacji** (a nie ich ilość!) oraz ich wpływ jakie wywierają na kształtowanie kierunków badawczych w danym środowisku naukowym. W tym miejscu trzeba więc podkreślić, że są to publikacje w zdecydowanej większości bardzo wartościowe i stanowiące ważny wkład w rozwój dyscypliny reprezentowanej przez habilitantkę. Świadczy o tym wysoka ranga czasopism w których zostały opublikowane: *Chem. Soc. Rev.*, *J. Org. Chem.*, *RSC Advances*, *ChemPhysChem*, *PhysChemChemPhys*, *J. Phys. Chem. A*, *J. Phys. Chem. B*, *J. Chem. Phys.*, *Int. J. Quantum Chem.* (wymieniłem tylko te z IF > 2.5). Pozostałe publikacje zostały opublikowane w czasopismach z IF w przedziale <1 – 2.5>. Należy również dodać, że poza publikacjami w czasopismach objętych bazą JCR, habilitantka jest współautorem **2 rozdziałów w monografiach** wydanych przez Springer Science+Business Media oraz **1 rozdziału** w pracy zbiorowej wydanej przez PWN (w wersji polskiej i angielskiej). W oparciu o w/w kryteria i fakty uważam, że **dorobek naukowy dr Joanny E. Rode jest znaczący i wartościowy i zasługuje na bardzo wysoką ocenę.**

Z dokumentacji wynika, że habilitantka poza dorobkiem publikacyjnym ma jeszcze dorobek związany z prezentacją wyników badań własnych i współautorów na konferencjach międzynarodowych i krajowych, który obejmuje **4 referaty własne**, w tym 3 na konferencjach międzynarodowych (wszystkie po uzyskaniu stopnia doktora) oraz **46 prezentacji plakatowych** (**23** na konferencjach międzynarodowych i **23** na konferencjach

krajowych. Osobiście, habilitantka przedstawiła **13** prezentacji na konferencjach międzynarodowych i **13** na konferencjach krajowych), co biorąc pod uwagę blisko 20-letni okres kariery naukowej i fakt, że prezentacje na konferencjach międzynarodowych stanowiły połowę wszystkich prezentacji, należy uznać to za znaczące osiągnięcie habilitantki.

W oparciu o dostarczone materiały stwierdzam również, że dr Joanna Ewa Rode, poza 7-miesięcznym stażem (w trakcie realizacji pracy doktorskiej) na Uniwersytecie Oakland w Rochester (USA) w zespole prof. M. Szcześniak, **nie odbyła żadnego długoterminowego stażu podoktorskiego** w ośrodku zagranicznym ani krajowym i w konsekwencji nie ma dużego doświadczenia naukowego zdobytego w zagranicznych ośrodkach naukowych. Nie jest to oczywiście wymóg formalny w uzyskaniu stopnia doktora habilitowanego, ale na pewno stanowi bardzo ważny element w rozwoju naukowym każdego młodego pracownika naukowego. Nie odnoszę wrażenia, że sam pobyt w zespole prof. Szcześniak miał znaczący wpływ na dalszy kierunek rozwoju zainteresowań badawczych habilitantki.

Przegląd zainteresowań naukowych habilitantki (z konieczności skrótowy) **zasługuje na wysoką ocenę** i świadczy o Jej rozległych zainteresowaniach naukowych z zakresu chemii fizycznej i biofizyki, a nawet chemii jądrowej, solidnej i ugruntowanej wiedzy oraz dużej dojrzałości i aktywności naukowej. Potwierdzeniem tego są kierunki jej badań, które można podzielić na (i) analizę konformacyjną cząsteczek chiralnych mających znaczenie biologiczne i symulację ich widm otrzymanych różnorodnymi technikami spektroskopowymi, (ii) wyznaczanie konfiguracji absolutnej związków pochodzenia naturalnego, (iii) modelowanie reakcji chemicznych i (iv) modelowanie układów związanych z chemią jądrową. Wymiernym efektem tej aktywności badawczej jest współautorstwo w 21 publikacjach, które nie zostały ujęte w Jej osiągnięciu naukowym i stanowią cenny dorobek habilitantki.

Ważnym elementem oceny aktywności naukowej kandydata ubiegającego się o stopień doktora habilitowanego jest jego **aktywność w pozyskiwaniu środków na badania** i ich właściwym ich wykorzystaniu, co jest związane z przygotowaniem i kierowaniem własnymi projektami badawczymi. Do chwili obecnej dr Joanna Ewa Rode uzyskała finansowanie z Narodowego Centrum Nauki (NCN) na realizację **2** przygotowanych i kierowanych przez Nią projektów badawczych. W ramach pierwszego z nich powstały **3** oryginalne publikacje (**H3, H4, H7**) oraz **1** publikacja o charakterze przeglądowym (**H6**), które zostały włączone do jej osiągnięcia naukowego. Mam nadzieję, że w ramach drugiego projektu, którego zakończenie będzie miało miejsce w tym roku, powstaną kolejne nie mniej wartościowe publikacje. **Świadczy to niewątpliwie o wysokiej ocenie prowadzonej przez Nią tematyki badawczej przez gremia decydujące o przyznawaniu środków finansowych na badania, ale również o aktywności habilitantki w pozyskiwaniu funduszy na prowadzone badania.** W tym miejscu należy również podkreślić udział habilitantki w charakterze wykonawcy w obecnie realizowanym projekcie NCN, jak również wcześniej w tym samym charakterze w **5** projektach finansowanych przez KBN, MNiSzW i NCN oraz w **2** projektach finansowanych przez Komisję Europejską w ramach Programu COST oraz 7 Programu Ramowego.

W ocenie aktywności naukowej nie można również pominąć prowadzonej przez habilitantkę owocnej współpracy naukowej z osobami z ośrodków krajowych i zagranicznych w ramach kierowanych przez Nią projektów badawczych jak również w projektach kierowanych przez Jej partnerów badawczych. Świadczą o tym wspólne publikacje i oznacza to jednocześnie, że **habilitantka jest ceniona jako wartościowy merytorycznie partner.** Kolejnymi faktami potwierdzającymi wysoką wiedzę habilitantki jest zaproszenie Jej do recenzji publikacji naukowych w czasopiśmie z listy JCR (m.in. *J. Phys. Chem. A*,

Tetrahedron, Comput. Theor. Chem. J.) oraz zarekomendowanie Jej kandydatury do Zespołu Ekspertów w panelu tematycznym ST4: *chemia analityczna i fizyczna* do oceny wniosków złożonych w konkursach OPUS 13 i PRELUDIUM 13.

Dopełnieniem bardzo pozytywnej oceny dorobku naukowego habilitantki jest przyznanie: Nagrody Dyrektora IChP za publikację przeglądową, która została włączona do osiągnięcia naukowego habilitantki, Nagrody Zespołowej I-go stopnia im. Świętosławskiego RN IChP za wybitne osiągnięcia naukowe w dziedzinie chemii oraz dwukrotnie Nagród Zespołowych I-stopnia Dyrektora IChTJ.

Działalność dydaktyczna, popularyzatorska, organizacyjna. Z obowiązku recenzenta nie mogę pominąć w swojej ocenie działalności dydaktycznej, popularyzatorskiej i organizacyjnej dr Joanny Ewy Rode. Ze względu na fakt, że habilitantka w całym dotychczasowym okresie swojej aktywności naukowej była zatrudniona w instytutach badawczych (IChP, IChTJ) oraz instytucie podległym PAN-owi (IChO PAN) (instytucjach bez wyraźnych obowiązków dydaktycznych), Jej działalność dydaktyczna ograniczyła się jedynie do przygotowania dwóch rozdziałów mających charakter dydaktyczny w pracy zbiorowej „*Spektroskopia oscylacyjna. Od teorii do praktyki*” wydanych przez PWN oraz wygłoszenia wykładu o charakterze popularyzatorskim w IChO PAN dla młodzieży z Technikum Chemicznego. W załączonych materiałach nie znalazłem żadnej informacji związanej z działalnością organizacyjną habilitantki.

W podsumowaniu mojej recenzji wyrażam opinię, że zarówno „osiągnięcie naukowe” jak i pozostały dorobek naukowy habilitantki jest znaczący i wartościowy a Jej aktywność naukowa spełnia wszystkie kryteria wymagań oczekiwane od kandydata ubiegającego się o stopień doktora habilitowanego. Dorobek ten wnosi zauważalny wkład do nurtu badawczego związanego z własnościami strukturalnymi i oddziaływaniami międzycząsteczkowymi cząsteczek chiralnych i wykorzystaniem do realizacji tych celów spektroskopii oscylacyjnego dichroizmu kołowego. O dojrzałości habilitantki jako naukowca świadczy także fakt przedstawienia w swoim autoreferacie dalszych planów badawczych stanowiących twórcze rozwinięcie tematyki zawartej w pracy habilitacyjnej.

Reasumując stwierdzam, że przedstawiona dokumentacja upoważnia mnie do sformułowania końcowego wniosku, że **Habilitantka spełnia całkowicie wymagania** przewidziane przepisami opublikowanymi w postaci zmian w Dz.U. z 2011 r. Nr 84, poz. 455 – tzw. *nowa habilitacja* i obowiązującymi od 1 października 2011 roku wraz z późniejszymi zmianami) oraz kryteria zwyczajowe i **popieram wniosek dr Joanny Ewy Rode o nadanie jej stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych.**



(Krzysztof Bobrowski)

Warszawa, 12 czerwca 2019