

Uzasadnienie wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego dr Paulinie Dominiak

W dniu 5. grudnia 2013 roku odbyło się posiedzenie ds. postępowania habilitacyjnego dr Pauliny Dominiak, która przedstawiła osiągnięcie habilitacyjne w postaci cyklu publikacji naukowych, zatytułowane „Bank asferycznych atomów i jego rola w krystalografii i biologii strukturalnej”. W posiedzeniu wzięli udział wszyscy członkowie komisji powołani przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego oraz przez Centralną Komisję ds. Stopni i Tytułów Naukowych, w składzie:

Dr hab. inż. Anna Dołęga – członek komisji
Prof. dr hab. Marianna Kańska – członek komisji
Prof. dr hab. Andrzej Katrusiak – recenzent
Prof. dr hab. Robert Moszyński – sekretarz komisji
Prof. dr hab. inż. Andrzej Ożyhar – przewodniczący komisji
Prof. dr hab. Joanna Sadlej – recenzent
Prof. dr hab. inż. Wojciech Wolf – recenzent

Komisja zapoznała się z oceną jednotematycznego cyklu publikacji oraz ogólnym dorobkiem naukowym dr Pauliny Dominiak przygotowaną przez trzech recenzentów: prof. dr hab. Joannę Sadlej z Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego, prof. dr hab. Andrzeja Katrusiaka z Wydziału Chemii Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu i prof. dr hab. inż. Wojciecha Wolfa z Wydziału Chemicznego Politechniki Łódzkiej oraz opinii dr hab. inż. Anny Dołęgi z Wydziału Chemicznego Politechniki Gdańskiej i prof. dr hab. Marianny Kańskiej z Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Wszystkie recenzje były pozytywne i zakończone konkluzją, że zarówno jednotematyczny cykl publikacji, jak i dorobek naukowy, organizacyjny oraz dydaktyczny Kandydatki spełniają ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie chemii.

Przewodniczący komisji, prof. dr hab. inż. Andrzej Ożyhar, zainicjował dyskusję na temat osiągnięcia habilitacyjnego przedstawionego przez dr Paulinę Dominiak i poprosił członków komisji, w pierwszym rzędzie recenzentów, o scharakteryzowanie osiągnięcia i uzasadnienie uchwały o nadanie stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych dr Paulinie Dominiak.

Prof. dr hab. Joanna Sadlej, recenzentka wyznaczona przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego stwierdziła, że wchodzący w skład rozprawy zbiór ośmiu publikacji jest owocem pracy zbiorowej. W czterech publikacjach Habilitantka jest autorem korespondencyjnym. Po zapoznaniu się z załączonymi oświadczeniami współautorów stwierdziła, że „*udział intelektualny i wykonawczy Habilitantki w tych publikacjach współautorskich, składających się na rozprawę habilitacyjną jest wiodący*”. Następnie, prof. Sadlej zauważyła, że w publikacjach przedstawionych jako osiągnięcie habilitacyjne dr Paulina Dominiak podjęła pracę nad udoskonaleniem i rozwojem banku danych UBDB opracowanym w zespole prof. Coppensa w latach 2002-2004 w oparciu o obliczone czynniki struktury. Przedstawione badania własne Autorka rozwijała przede wszystkim w kierunku rozbudowy bazy asferycznych atomów o możliwie jak największą liczbę typów atomów występujących w biomolekułach. Bardzo ważnym czynnikiem sprzyjającym rozwojowi tego typu badań jest możliwość praktycznego ich wykorzystywania w wielu problemach. Dlatego prof. Sadlej uznała, że „*temat ten jest dobrze zdefiniowany i dotyczy zagadnień związanych ze strukturą molekuł, mieszcząc się w nurcie aktualnych naukowych tematów badawczych*”.

Podsumowując swoją wypowiedź prof. dr hab. Joanna Sadlej stwierdziła, że „*wyniki badań uzyskane przez Habilitantkę w sposób istotny poszerzają dotychczasową wiedzę w dziedzinie krystalografii, a poziom naukowy prac świadczy o dojrzałości naukowej Autorki. Cykl publikacji opisujący osiągnięcie habilitacyjne ocenia pozytywnie pod względem ich wartości naukowej. Uznała również, że wydzielony od rozprawy habilitacyjnej dorobek naukowy jest poważny. Podkreśliła, że Habilitantka ma własną tematykę i opanowany warsztat badawczy. Zatem, ponieważ spełnione są wymogi Ustawy o stopniach naukowych i tytułach naukowych oraz o stopniach i tytułach w zakresie sztuki, wniosła o dopuszczenie dr*

Dominiak do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego”.

Prof. dr hab. Andrzej Katrusiak, recenzent wyznaczony przez Centralną Komisję, stwierdził, że w pełni zgadza się z przedmówczynią. Ponadto dodał, że prowadzone przez Habilitantkę badania są interdyscyplinarne i wymagają od niej praktycznych umiejętności z pogranicza chemii, fizyki, biotechnologii, programowania i obsługi baz danych. Z tego powodu praca Habilitantki w dużych zespołach jest zrozumiała a uzyskane dzięki temu wiedza i doświadczenie predysponują ją do samodzielnej pracy naukowej. Oświadczenia współautorów oraz jej miejsce w liście autorów i publikacji habilitacyjnych nie pozostawiają wątpliwości co do jej roli w powstaniu prac, których jest współautorem. Otrzymywane przez nią wyniki mają nie tylko znaczenie poznawcze, ale też praktyczne i zmierzają do lepszego poznania struktury materii oraz do ułatwienia badań strukturalnych. Jest to bardzo perspektywiczny kierunek badań i należy się spodziewać, że zapotrzebowanie na korzystanie z banku asferycznych atomów w krytalografii i biologii strukturalnej będzie systematycznie rosło. Bardzo dobrze wróży to dalszej, już samodzielnej, karierze naukowej Habilitantki. Prof. dr hab. Andrzej Katrusiak podkreślił *„znaczący dorobek naukowy zawarty w rozprawie habilitacyjnej i pełny dorobek Habilitantki, a także jej aktywność konferencyjną, w pracy organizacyjnej i istotne doświadczenie w pracy dydaktycznej”.*

W podsumowaniu prof. dr hab. Andrzej Katrusiak stwierdził że *„dr Paulina Dominiak spełnia wszelkie wymogi ustawowe do uzyskania stopnia naukowego dr. habilitowanego”.*

Prof. dr hab. inż. Wojciech Wolf, recenzent wyznaczony przez Centralną Komisję, stwierdził, że zainteresowania naukowe Habilitantki skupiły się na zastosowaniu i rozwoju metod wykorzystujących banki atomów asferycznych do udokładniania struktur kryształów, dla których rozdzielczość danych dyfrakcyjnych utrudnia zastosowanie pełnego modelu multipolowego. Obserwowany w ostatnich latach dynamiczny rozwój naukowy dr Pauliny Dominiak jest związany z zastosowaniem powyższej metodyki do badania wielu złożonych układach molekularnych o istotnym znaczeniu chemicznym lub biochemicznym. Recenzent podkreślił, że *„formalny dorobek naukowy Habilitantki jest szeroki. Lista publikacji składających się na osiągnięcie habilitacyjne obejmuje łącznie osiem prac oraz trzydzieści trzy inne publikacje, które ukazały się w recenzowanych czasopismach z listy JCR Thomsona Reutersa i rozdział w i monografii „Modern Charge-Density Analysis”. Sumaryczny współczynnik wpływu jest bardzo wysoki, zwłaszcza uwzględniając wiek Habilitantki i przekracza dwieście szesnaście. Recenzowane osiągnięcie naukowe zostało opisane w cyklu powiązanych ze sobą publikacji, które przedstawiają dokonania o bardzo dobrym poziomie naukowym i wskazują na uzyskanie przez Habilitantkę zdolności do samodzielnej pracy badawczej. Nabycie umiejętności do samodzielnego formułowania i rozwiązywania problemów naukowych jest głównym kryterium podlegającym ocenie podczas procedury uzyskania stopnia doktora habilitowanego”.*

Podsumowując, prof. dr hab. inż. Wojciech Wolf stwierdził, że *„analiza dorobku naukowego dr Pauliny Dominiak w wyraźny sposób dowodzi, że posiada ona szeroką wiedzę i umiejętności z zakresu krytalochemii i nowoczesnej analizy strukturalnej złożonych układów molekularnych i makromolekularnych. Podkreślił, że zarówno recenzowany dorobek naukowy, jak i opisująca go dokumentacja spełniają wymogi określone w Ustawie z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach i tytule naukowym oraz w Rozporządzeniu Ministra Edukacji Narodowej z 22 września 2011 roku w sprawie szczegółowego trybu i warunków przeprowadzania czynności w przewodach doktorskich, w postępowaniu habilitacyjnym oraz w postępowaniu o nadanie tytułu profesora”.*

W swoim wystąpieniu dr hab. inż. Anna Dołęga, członek komisji wyznaczony przez Centralną Komisję ds. Stopni i Tytułów Naukowych, wyraziła zadowolenie z zaproszenia do zaopiniowania dorobku bardzo dobrej i pracowitej młodej uczoniej. Stwierdziła, że dr Dominiak uczestniczy (jako wiodący „udziałowiec”) w tworzeniu bazy asferycznych pseudoatomów stosowanych do budowania map gęstości elektronowych małych i dużych cząsteczek. W swoich badaniach dr Paulina Dominiak wykazała się zarówno wymaganą samodzielnością jak i odpowiednim krytycyzmem w stosunku do własnych osiągnięć i możliwości stosowanej metody. Ponadto, dr hab. Inż. Anna Dołęga podkreśliła, że z przedstawionej dokumentacji wynika, że już w chwili obecnej dr Dominiak prowadzi badania naukowe

samodzielnie, zdobywając na ten cel pieniądze i sterując pracą magistrantów i doktorantów. W opinii dr hab. Inż. Anny Dołęgi, „*dr Paulina Dominiak spełnia wszelkie wymogi ustawowe do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, dyscyplina chemia.*”

W uzupełnieniu do swoich przedmówców, prof. dr hab. Marianna Kańska, członek komisji wybrany przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego podkreśliła, że publikacje składające się na osiągnięcie habilitacyjne dr Pauliny Dominiak ukazały się w bardzo dobrych czasopismach naukowych takich, jak: *Acta Crystallogr*, *J. Chem. Theory Comput.* i *J. Phys. Chem. A.*, których współczynnik wpływu (IF) mieści się w przedziale od 2 do 4,3. Indeks Hirscha dr Dominiak wynosi 14. Wszystkie prace Habilitantki były cytowane 614 razy, a sumaryczny współczynnik wpływu według listy JCR wynosi 216. Dr Paulina Dominiak była również współautorem 1 rozdziału w monografii, która ukazała się w wydawnictwie Springer. Dr Dominiak prezentowała wyniki swojej pracy na kilkudziesięciu konferencjach naukowych krajowych i zagranicznych. Była kierownikiem czterech grantów badawczych finansowanych przez MNiSzW lub Fundację na rzecz Nauki Polskiej i beneficjentem grantu promotorskiego finansowanego przez Komitet Badań Naukowych. W konkluzji swojej wypowiedzi, prof. dr hab. Marianna Kańska stwierdziła, że „*dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny dr Pauliny Dominiak w pełni uzasadniają wystąpienie komisji do Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego o nadanie dr Paulinie Dominiak stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, dyscyplina chemia.*”

Przewodniczący komisji, prof. dr hab. inż. Andrzej Ożyhar, podsumował dyskusję i stwierdził, że w oparciu o własną pozytywną opinię na temat przedstawionych przez dr hab. Paulinę Dominiak materiałów oraz opinie recenzentów i członków komisji zarządza głosowanie w trybie jawnym nad wnioskiem o nadanie dr Paulinie Dominiak stopnia naukowego doktora w dziedzinie nauk chemicznych, dyscyplina chemia. Komisja w głosowaniu przeprowadzonym w trybie jawnym (7 głosów ważnych, 7 głosów tak, 0 głosów nie, 0 głosów wstrzymujących) podjęła uchwałę o następującej treści:

„*Komisja Habilitacyjna, powołana przez Centralną Komisją do Spraw Stopni i Tytułów 22 maja 2013 r. w celu przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego dr Pauliny Dominiak, po zapoznaniu się z jednotematycznym cyklem publikacji i ogólnym dorobkiem Kandydata oraz recenzjami, rekomenduje Radzie Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego nadanie dr Paulinie Dominiak stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, dyscyplinie chemia.*”

Przewodniczący komisji: prof. dr hab. inż. Andrzej Ożyhar.....

Sekretarz komisji: prof. hab. Robert Moszyński.....

Recenzent: prof. dr hab. Andrzej Katrusiak.....

Recenzent: prof. dr hab. Joanna Sadlej.....

Recenzent: prof. dr hab. Inż. Wojciech Wolf.....

Członek komisji: dr hab. Inż. Anna Dołęga.....

Członek komisji: prof. dr hab. Marianna Kańska.....

Warszawa, 5 grudnia 2013

**Uchwała Komisji habilitacyjnej powołanej w sprawie postępowania habilitacyjnego
dr Pauliny Dominiak**

Komisja ds. postępowania habilitacyjnego dr Pauliny Dominiak w składzie:

Dr hab. Inż. Anna Dołęga – członek komisji

Prof. dr hab. Marianna Kańska – członek komisji

Prof. dr hab. Andrzej Katrusiak – recenzent

Prof. dr hab. Robert Moszyński – sekretarz komisji

Prof. dr hab. inż. Andrzej Ożyhar – przewodniczący komisji

Prof. dr hab. Joanna Sadlej – recenzent

Prof. dr hab. inż. Wojciech Wolf - recenzent

w głosowaniu przeprowadzonym w trybie jawnym, z wynikiem głosowania 7 głosów za, 0 głosów wstrzymujących i 0 głosów przeciw, przyjęła uchwałę następującej treści:

„Komisja Habilitacyjna powołana przez Centralną Komisję ds. Stopni i Tytułów Naukowych dnia xx października 2013 roku w celu przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego dr Pauliny Dominiak, po zapoznaniu się z jednotematycznym cyklem publikacji i ogólnym dorobkiem Kandydatki oraz recenzjami, rekomenduje Radzie Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego nadanie dr Paulinie Dominiak stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, dyscyplina chemia.”

Prof. dr hab. Andrzej Ożyhar
Przewodniczący Komisji

Warszawa, 5 grudnia 2013

**Lista obecności na posiedzeniu Komisji habilitacyjnej powołanej w sprawie
postępowania habilitacyjnego dr Pauliny Dominiak**

Przewodniczący komisji: prof. dr hab. inż. Andrzej Ożyhar.....
Sekretarz komisji: prof. dr hab. Robert Moszyński.....
Recenzent: prof. dr hab. Andrzej Katrusiak.....
Recenzent: prof. dr hab. Joanna Sadlej.....
Recenzent: prof. dr hab. inż. Wojciech Wolf.....
Członek komisji: dr hab. inż. Anna Dołęga.....
Członek komisji: prof. dr hab. Marianna Kańska.....