

**Zakład Chemii Materiałów, Wydział Chemii,  
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Umultowska 89b, 61-614 Poznań**

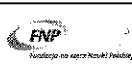
Prof. dr hab. Andrzej Katrusiak

Poznań, 18 października, 2013

L.dz. 221/2013

**Recenzja dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego  
dr Pauliny Marii Dominiak,  
w związku z wnioskiem Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego  
o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego**

Dr Paulina Maria Dominiak (ur. 27/11/1976 w Rzeszowie) od kilkunastu lat zajmuje się dyfraktometrycznym wyznaczaniem gęstości elektronowej kryształów na podstawie analizy multipolowej i zastosowaniem jej wyników do rozwoju bazy danych atomów asferycznych (University of Buffalo DataBank, UBDB), służącej do polepszenia udokładniania struktur zmierzonych przy przeważnie stosowanej (około 0.85 Å) i niższej rozdzielczości danych dyfrakcyjnych. W roku 2000 Habilitantka ukończyła studia biologiczne uzyskując stopień naukowy magistra na Uniwersytecie Warszawskim, a rok później na tymże uniwersytecie obroniła pracę magisterską z chemii. W 2005 roku na Wydziale Chemii UW obroniła rozprawę doktorską pod tytułem „Weak Interactions at Different Levels of Complexity in the Solid State”, promotorem której był prof. Krzysztof Woźniak. Za pracę doktorską uzyskała Nagrodę Grzegorza Białkowskiego, 2005, Towarzystwa Popierania i Krzewienia Nauk oraz Fundacji na rzecz Nauki Polskiej (FNP). Obecnie uzyskuje stypendium dla uzdolnionych młodych naukowców (edycja 2011-2014), Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego. Przed uzyskaniem stopnia doktora odbyła dwa kilkumiesięczne staże naukowe w Huntsville, AL USA, a po doktoracie w 2005-2006 dwuletni staż w State University of New York w Buffalo, NY, USA, gdzie w roku 2007 odbyła też krótki staż jako profesor wizytujący; podobny staż odbyła w 2009 na Université Henri Poincaré, Faculté des Science et Techniques, Vandoeuvre les Nancy, we Francji.



Dr Dominiak opublikowała 41 artykułów naukowych w czasopismach z listy filadelfijskiej, oraz jeden rozdział w książce typu monografii. Sumaryczny Impact Factor (IF) wynosi 216.2, ich liczba cytowań (obcych) wynosi 614 a indeks H 14; dr Dominiak określiła wkład własny w swoich współautorskich pracach od 5% (dla 8-miu prac) do 80% (w 1-nej pracy), podając równocześnie wykonane przez siebie zadania. Dr Dominiak zdobywała doświadczenie w znakomitym rodzimym ośrodku badań gęstości elektronowej prof. K. Woźniaka w Warszawie, i innych najlepszych na świecie zespołach badawczych prof. P. Coppens'a w Buffalo i prof. C. Lecomte'a w Nancy (ci obaj już w wieku emerytalnym), ale sama posiada niebagatelne doświadczenie i legitymuje się równocześnie kierowaniem pracami magisterskimi, opieką nad doktorantami i promotorstwem pomocniczym. Swoje wyniki prezentowała na kilku wystąpieniach konferencyjnych oraz trzech wykładach na zaproszenie, w tym na prestiżowej Gordon Conference w USA. Przedstawiła 14 plakatów konferencyjnych.

Spośród swoich artykułów dr Dominiak wybrała 8 prac, które opatrzone autoreferatem zatytułowanym „Bank asferycznych atomów i jego rola w krystalografii i biologii strukturalnej” i wymaganą przepisami dokumentacją, załączyła do wniosku o przeprowadzenie procedury habilitacyjnej. IF tych 8-miu prac wynosi od 1.7 do 4.3 (pomijając niebotycznie "rozdmuchany" jednym przeglądowo-metodycznym artykułem Georga Sheldrick'a z 2008 roku IF *Acta Crystallographica Sec. A* dochodzący do 50), średnia ilość współautorów 3.5, liczba cytowań tych prac to 98. W 3-ch pracach dr Dominiak jest pierwszym autorem a w 7-miu jedynym lub jednym z dwóch autorów korespondencyjnych. Swój udział w wykonaniu prac H1-H8 dr Dominiak określiła na 80, 70, 70, 40, 30, 30, 30 i 40%. Dokumentacja habilitacyjna zawiera oświadczenia współautorów prac Habilitantki, których większość nie pozostawia wątpliwości o znaczącej, jeśli nie wiodącej, roli i wkładzie pracy dr Dominiak w przygotowanie tych artykułów naukowych oraz o jej inicjatywie przeprowadzenia tych badań.

Podobnie, żadnych wątpliwości nie budzi wartość naukowa prowadzonych przez dr Dominiak badań. Zajmuje się ona wyznaczaniem gęstości elektronowej w kryształach, przeważnie molekularnych związków ważnych biologicznie. Cykl prac wybranych przez dr Dominiak jako rozprawa habilitacyjna stanowi cenny wkład w badanie różnych modeli odtwarzania gęstości elektronowej oraz zastosowań tych obecnie najdokładniejszych badań dyfraktometrycznych struktury kryształów. Jednym z podstawowych zastosowań, którym Habilitantka poświęciła dużo pracy, jest rozbudowa bazy UBDB, której zasoby gęstości elektronowej atomów asferycznych mają zwiększyć precyzję wszystkich badań dyfraktometrycznych, bez względu na jakość badanych

próbek krystalicznych i rozdzielczość uzyskanych danych pomiarowych. W założeniu, badania te mogą znacznie zwiększyć efektywność badań kryształów o niskiej jakości, na przykład kryształów białek i innych biopolimerów. Ich znaczenie praktyczne może więc być znaczne. Ogromnym osiągnięciem Habilitantki jest rozbudowa zasobów bazy UBDB i opracowywanie metod określenia modelu asferycznych atomów w zależności od ich usytuowania w strukturze. Jest to niezwykle złożone zadanie, wymagające dbałości w analizie otoczenia atomów w strukturze kryształów. Wszystkie prace dr Dominiak cechuje wysoka dbałość o szczegóły dopasowania, dzięki któremu uzyskała w wyniku przeprowadzonych udokładnień położenia atomów wodoru bardziej zbliżone do danych neutronograficznych niż w rutynowych udokładnieniach ze sferycznymi rozkładami gęstości elektronowej atomów oraz znacznie obniżyła tło gęstości elektronowej na końcowych mapach różnicowych Fouriera. Począwszy od pierwszego artykułu habilitacji (H1) opublikowanego z Philip'em Coppens'em w 2006 roku, na temat asferycznych modeli atomu siarki, dr Dominiak systematycznie poszerza nie tylko zasoby asferycznych modeli różnych atomów, ale stosuje coraz bardziej wyrafinowane metody oceny tych modeli. Dr Dominiak prowadzi również badania mające na celu poszerzenie zastosowań precyzyjnych gęstości elektronowych, na przykład do obliczeń sił spójności kryształu, a w szczególności sił elektrostatycznych. Należy podkreślić, że Habilitantka prowadzi badania metodyczne wymagające dużego zaangażowania, wiedzy i nakładu pracy.

W komentarzu do prac habilitacyjnych zakradło się kilka mało znaczących błędów (np. "Atomic Displacement Parameters", czy "wstanie"), wyrażen nieco zbyt żargonowych (np. powtarzana "mapa różnicowa  $F_o-F_c$ " – oczywiście "chodzi" o "mapę różnicową Fouriera" lub inaczej "transformatę Fouriera dla  $F_o-F_c$ " [w stosowanym powszechnie skrócie  $\Delta F$  „F” oznacza „Fouriera”]; w innym miejscu Habilitantka pisze "energia kohezji sieci" – ta "sieć" jest pojęciem abstrakcyjnym, którego nie dotyczą siły **spójności**); często używa słowa "pochodna", także w zdaniu (cyt.) "...energii elektrostatycznej,  $E_{es}$ , jako że ta pochodna gęstości...", gdzie rozumienie "pochodnej" jako "różniczki" byłoby błędne; Habilitantka dała też wyraz silnego przywiązania do nielegalnej w Unii Europejskiej jednostki energii (cal.), co nie było możliwe w jej artykułach.

Dorobek dydaktyczny dr Dominiak jest znaczący. Kierowała ona 4-ma pracami magisterskimi w latach 2008-2012; dwie z tych prac uzyskały wyróżnienie. Była opiekunem jednej pracy magisterskiej i promotorem pomocniczym jednego doktoratu; nieformalnie pomagała 5-ciu doktorantom. Habilitantka prowadziła ćwiczenia z *Krystalografii z elementami teorii grup* na

studiach licencjackich chemii w 2013, ćwiczenia *Wstęp do krystalografii B* na studiach licencjackich Chemii w 2012, a także przygotowała wykład i ćwiczenia *Krystalografia A* dla bioanalitiky na poziomie studiów magisterskich w 2010; podobnie, w 2007 i 2009 prowadziła ćwiczenia z *Krystalografii*; a także *Specjalizacja z krystalografii* w latach 2007, 2009, 2012, 2013; *Elementy statystyki* w 2004, *Statystyka i bazy danych* w 2003-2004 na studiach licencjackich.

Habilitantka angażuje się również w działalność popularyzatorską nauki: na XI Festiwalu Nauki wygłosiła wykład pt. „Zobaczyć cząsteczki” oraz brała udział w pokazie Laboratorium Badań Strukturalnych Wydziału Chemii UW.

Dr Dominiak jest już rozpoznawana międzynarodowo, o czym świadczą zaproszenia do wygłaszania wykładów i wykonywania recenzji. Aktywnie zabiega także o środki finansowe: po doktoracie kierowała lub kieruje już 6-cioma znaczącymi grantami naukowymi. Angażuje się też w działalność organizacyjną (European Charge Density Meeting – ECDM7, 2015, Warszawa).

W całościowym podsumowaniu oceny dorobku naukowego, dokonań dydaktycznych i organizacyjnych dr Pauliny Marii Dominiak stwierdzam, że popieram wniosek Rady Wydziału Uniwersytetu Warszawskiego o nadanie jej stopnia naukowego doktora habilitowanego. Jej osiągnięcia naukowe, dydaktyczne i organizacyjne w pełni spełniają wymogi ustawowe w tym zakresie.

