

Prof. dr hab. Wojciech Wolf
Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej
Politechnika Łódzka
ul. Żeromskiego 116
90-924 Łódź

Łódź, dnia 26 listopada 2013 roku

Recenzja dorobku doktor Pauliny Marii Dominiak sporządzona w związku z postępowaniem habilitacyjnym w dziedzinie nauk chemicznych w dyscyplinie chemia

Po ukończeniu podwójnych studiów z zakresu chemii oraz biologii Doktor Pulina Dominiak związała swój rozwój naukowy z szeroko rozumianą analizą rentgenograficzną kryształów, a w szczególności z jej zastosowaniem do badania oddziaływań wiążących i niewiązących w ciałach stałych. Rozprawę doktorską wykonaną pod kierunkiem Profesora Krzysztofa Woźniaka i opatrzoną intrygującym tytułem „Słabe oddziaływania na różnych poziomach organizacji materii w fazie stałej” obroniła na Wydziale Chemicznym Uniwersytetu Warszawskiego w 2005 roku. Praca ta została wyróżniona przez Towarzystwo Popierania i Krzewienia Nauk oraz Fundację na rzecz Nauki Polskiej nagrodą im. Grzegorza Białkowskiego za najlepszą pracę z zakresu chemii. W latach 2006-2007 odbyła długoterminowy staż podoktorski na Wydziale Chemii Uniwersytetu w Buffalo. Po powrocie do kraju została zatrudniona na stanowisku adiunkta w macierzystym wydziale, a Jej zainteresowania naukowe 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 Doktor Dominiak jest związany z zastosowaniem powyższej metodyki do badania wielu złożonych układach molekularnych o istotnym znaczeniu chemicznym lub biochemicznym.

Ocena formalna wniosku

Formalny dorobek naukowy Doktor Dominiak jest szeroki. Załączona lista publikacji obejmuje łącznie osiem prac wchodzących w zakres habilitacji, trzydzieści trzy inne publikacje, które ukazały się w recenzowanych czasopismach z listy JCR Thomsona Reutersa oraz rozdział w międzynarodowej monografii „Modern Charge-Density Analysis”.

Sumaryczny współczynnik wpływu jest bardzo wysoki, zwłaszcza uwzględniając wiek Habilitantki i przekracza dwieście szesnaście.

Znakomita większość publikacji ukazała się po obronieniu pracy doktorskiej. Wysoka jest liczba cytowań prac, która bez uwzględnienia autocytowań wynosiła (w dniu 21 maja 2013 roku) 614. Również tak często w ostatnich latach używany indeks Hirscha przyjmuje znaczącą jak na pracę habilitacyjną wartość równą 14. Oznacza to, że aż 14 publikacji było cytowanych przez innych autorów co najmniej 14 razy.

Wyniki swoich badań Doktor Dominiak przedstawiała także na konferencjach naukowych w ośmiu wystąpieniach ustnych i czternastu komunikatach plakatowych. Wyrazem uznania środowiska naukowego było powierzenie jej recenzowania szeregu prac w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym oraz zaproszenie do udziału w pracach komitetu oceniającego projekty badawcze z zakresu struktury materiałów kierowane do francuskiego narodowego centrum synchrotronowego Soleil znajdującego się pod Paryżem.

Ocena prac stanowiących osiągnięcie naukowe zgłoszone do przewodu habilitacyjnego p.t. „Bank asferycznych atomów i jego rola w krystalografii i biologii strukturalnej”

Seria prac przedstawionych w postępowaniu habilitacyjnym składa się z ośmiu artykułów opublikowanych w recenzowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Na podkreślenie zasługuje fakt, że Doktor Dominiak jest autorem korespondującym w siedmiu spośród ww. publikacji. Sumaryczny współczynnik wpływu obliczony na podstawie danych przedstawionych w Autoreferacie wynosi 67,345. Tak wysoka wartość wynika częściowo z przypisania współczynnika $IF(2009)=49,93$ pracy opublikowanej w *Acta Crystallographica A65*, 490-500. W roku 2009 z powodu bardzo wysokiej liczby cytowań publikacji George'a Sheldricka czasopismo to uzyskało chwilowo tak wysoki współczynnik wpływu. Obecnie wynosi on 2,244.

Do przesłanej dokumentacji został dołączony bardzo obszerny i starannie zebrany zbiór oświadczeń współautorów publikacji, którzy wszyscy bardzo zgodnie stwierdzili, że prace będące przedmiotem postępowania habilitacyjnego zostały zaplanowane i napisane w przeważającej części przez Doktor Dominiak, a ich osobisty udział dotyczył dyskusji uzyskanych rezultatów albo częściowych prac obliczeniowych lub softwarowych. W przypadku publikacji powstałych z udziałem doktorantów, nad którymi opiekę sprawowała

Habilitantka, Jej udział w sformułowaniu celu badawczego oraz zaproponowaniu metody jego rozwiązania jest oczywisty. Uważam zatem, że zgodnie z powyższymi oświadczeniami, decydujący wkład Doktor Dominiak w powstanie powyższych prac nie ulega wątpliwości i mogą one bez zastrzeżeń stanowić część osiągnięcia naukowego zgłoszonego do przewodu habilitacyjnego.

Podstawowym celem badań przedstawionym we wniosku było rozszerzenie i udoskonalenie tzw. banku atomów asferycznych UBDB. Został on utworzony przez Profesora Coppensa i następnie bardzo znacznie rozwinięty przez Doktor Dominiak. Jest to jeden z trzech tego typu banków stosowanych obecnie do określania rozkładu gęstości elektronowej w kryształach. Dzięki pracy Habilitantki wprowadzono do niego ponad 200 rodzajów atomów reprezentujących pierwiastki takie jak C, H, N, O, S, P, B, F, Cl oraz I. Umieszczone w nim parametry zostały obliczone na podstawie analizy gęstości elektronowych ponad 600 cząsteczek. Należy podkreślić, że w banku UBDB znajdują się wszystkie typy atomów niezbędne do opisanie białek i kwasów nukleinowych oraz większości związków organicznych o znaczeniu biologicznym. Najnowsza jego wersja w połączeniu z obsługującym bank programem LSDB jest udostępniona użytkownikom za pomocą.

Najciekawsze wyniki uzyskane przez Habilitantkę są związane z obliczeniami energii oddziaływań elektrostatycznych cząstek w kryształach szeregu związków i próbami porównania topologii gęstości elektronowej otrzymanej różnymi metodami. Dość kontrowersyjny, aczkolwiek zgodny z doświadczeniami recenzenta, wydaje się wniosek, że właściwości geometryczne modeli udokładnianych za pomocą multipolowego modelu atomów są bardzo zbliżone do modeli cząstek swobodnych.

Bardzo wartościowe są również wyniki badań wpływu subtelnych dyslokacji gęstości elektronowej w białku neuramidaza wirusa grypy na sposób kompleksowania szeregu inhibitorów peptydowych. Na podstawie dostępnych danych strukturalnych Habilitantce udało się zidentyfikować aminokwasy odpowiedzialne za oddziaływania elektrostatyczne z inhibitorami peptydowymi i wykazać zależność pomiędzy eksperymentalnie wyznaczonymi stałymi równowagi wiązania inhibitorów, a ich energią oddziaływań elektrostatycznych z centrum aktywnym enzymu.

Na szczególne podkreślenie zasługuje walor metodyczny badań prowadzonych przez Doktor Dominiak. Ich tematyka znajduje się bowiem w centrum zainteresowania współczesnej krytalografii i analizy strukturalnej. Udoskonalenie metody udokładniania struktur kryształów i wykorzystanie w tym celu modelu multipolowego oraz parametrów pochodzących z banku atomów asferycznych w wielu przypadkach pozwala na określenie wpływu subtelnych zmian gęstości elektronowej na właściwości kryształów, dla których nie było możliwe zarejestrowanie

wysokorozdzielczych danych dyfrakcyjnych. Pozwala to na potencjalne wykorzystanie zdeponowanych w Cambridge Structure Data Base oraz Protein Data Bank danych strukturalnych i otwiera bardzo szerokie pole do badań subtelných oddziaływań w setkach tysięcy związków chemicznych i układów biologicznych.

Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Doktor Dominiak kieruje grupą badawczą składającą się ze słuchaczy studium doktoranckiego i zajmującą się krystalochemią. Jest członkiem komitetu organizacyjnego prestiżowej konferencji „European Charge Density Meeting – ECDM7”, która odbędzie się w Warszawie w 2015 roku. Prowadzi zajęcia dydaktyczne z zakresu krystalografii i statystyki dla studentów Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Była także opiekunem kilku prac magisterskich, których tematyka była związana z zastosowaniem banku atomów asferycznych do obliczeń właściwości elektronowych różnych obiektów molekularnych.

Uwagi końcowe

Recenzowany 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 recenzję, stwierdzam, że Doktor Dominiak wniosła istotny wkład w udoskonalenie bazy danych asferycznych atomów transferowalnych UBDB. Parametry zdeponowane w tej bazie mogą zostać wykorzystane w procesie udokładniania złożonych struktur kryształów w celu lepszego odwzorowania gęstości elektronowej. W szeregu publikacji Habilitantka wykazała, że ich zastosowanie pozwala obliczyć gęstość elektronową w kryształach o topologii porównywalnej z uzyskaną w wyniku klasycznego udokładniania w modelu multipolowym dla wysokorozdzielczych danych dyfrakcyjnych. Przedstawione fakty zostały prawidłowo zinterpretowane, a analiza dorobku naukowego Doktor Dominiak w wyraźny sposób dowodzi, że posiada ona szeroką wiedzę i umiejętności zakresu krystalochemii i nowoczesnej analizy strukturalnej złożonych układów molekularnych i

makromolekularnych. Pragnę podkreślić, 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. Składam zatem wniosek o przyjęcie rozprawy i dopuszczenie Doktor Pauliny Marii Dominiak do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

