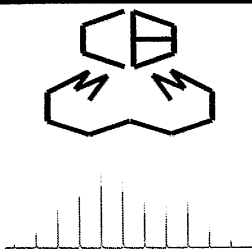

POLSKA AKADEMIA NAUK
CENTRUM BADAŃ MOLEKULARNYCH I
MAKROMOLEKULARNYCH
W ŁÓDZI
PRACOWNIA MAGNETYCZNEGO REZONANSU
JĄDROWEGO
90-363 ŁÓDŹ; UL. SIENKIEWICZA 112
TEL (0-42) 68 03 240
FAX (0-42) 684-71-26
E-MAIL; MAREKPOT@bilbo.cbmm.lodz.pl



POLISH ACADEMY OF SCIENCES
CENTRE of MOLECULAR and MACROMOLECULAR
STUDIES
NMR LABORATORY
90-363 ŁÓDŹ;
SIENKIEWICZA 112 POLAND
TEL (0-42) 68 03 240
FAX (0-42) 684-71-26
E-MAIL; MAREKPOT@bilbo.cbmm.lodz.pl

Laboratory equipped with BRUKER® spectrometers

7 czerwca, 2015

Prof. dr hab. Marek J. Potrzebowski

Recenzja rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego dra Tomasza Gubicy pt. ;
**“Analiza strukturalna glikozydów za pomocą metod teoretycznych i
eksperymentalnych”**

Sylwetka Habilitanta;

Dr Tomasz Gubica jest absolwentem Uniwersytetu Warszawskiego, Wydziału Chemii. Pracę magisterską zatytułowaną „*Próba syntezy pochodnych ureidokwasów*” wykonaną pod opieką prof. dr hab. Jana Izdebskiego obronił w roku 2002. Również na Wydziale Chemii, Uniwersytetu Warszawskiego zrealizował swoją pracę doktorską, której promotorem był prof. dr hab. Andrzej Temeriusz. Obrona dysertacji pod tytułem „*Studia nad strukturą i oddziaływaniem nitrofenylowych pochodnych sacharydów z cyklodekstrynami w wybranych procesach fizykochemicznych*” odbyła się w roku 2007. Po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych dr Tomasz Gubica został zatrudniony na etacie specjalisty naukowo-technicznego (lata 2007 – 2010) na Wydziale Chemii, Uniwersytetu Warszawskiego a następnie w tej samej Instytucji na etacie adiunkta. W roku 2010 zmienił miejsce zatrudnienia i rozpoczął pracę na Wydziale Farmaceutycznym z Oddziałem Medycyny Laboratoryjnej, Warszawskiego Uniwersytetu Medycznego gdzie jest zatrudniony do tej pory na etacie adiunkta.

W załączonych materiałach niestety nie znalazłem informacji o międzynarodowych doświadczeniach Habilitanta, np. odbytych stażach długoterminowych czy innych elementach istotnych w rozwoju warsztatu naukowego.

Ocena rozprawy habilitacyjnej;

Podstawą dysertacji jest 8 oryginalnych artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach znajdujących się na tzw. "liście filadelfijskiej". Wszystkie prace są artykułami wieloautorskimi. Z niewielkimi wyjątkami, prace opublikowane są w czasopismach o umiarkowanym współczynniku oddziaływania jak np. Carbohydrate Research (trzy publikacje IF2008 =1,960, IF2009 = 2,025, IF2011 = 2,332), Journal of Molecular Structure (trzy publikacje IF2012 =1,404, IF2013 =1,599), Tetrahedron (dwie prace, IF2013 = 2,817). W sześciu spośród ośmiu prac wielo-autorskich dr Gubica jest pierwszym autorem, w sześciu pełni rolę tzw "corresponding author" (listy te nie są identyczne). Współautorzy artykułów złożyli odpowiednie oświadczenia o udziałach oraz wkładzie intelektualnym i manualnym w realizację poszczególnych zadań badawczych. Z załączonych dokumentów wynika, że dr Gubica był zarówno wykonawcą jak i osobą kreującą profil badawczy. Udział procentowy w zrealizowanych projektach Habilitant ocenił bardzo wysoko, na poziomie 55%-75%. Zwykle taka informacja wprawia recenzenta w zakłopotanie bo rodzi się pytanie, szczególnie przy pracach wieloautorskich jaki jest realny udział pozostałych współautorów, czy w ogóle uzasadnia ich współautorstwo.

Sumaryczny „Impact Factor” oryginalnych prac zebranych jako dorobek habilitacyjny wynosi ok. 16.55, średni 2.07. Prace te zostały wykonane w ciągu sześciu lat. Pierwsza z publikacji ukazała się w roku 2008, najnowsza z prac została opublikowana w roku 2014.

Motywy przewodnim habilitacji są pomiary fizykochemiczne i obliczenia teoretyczne dla chemicznie modyfikowanych glikozydów. Habilitant samodzielnie prowadził wieloetapowe syntezy otrzymując 27 pochodnych cukrowych. W sumie badaniom poddał 31 różnych analogów glikozydów. Rozprawa ma charakter wielowątkowy i interdyscyplinarny z wykorzystaniem kilku technik instrumentalnych: rentgenografia monokryształów (XRD,) rentgenografia substancji sproszkowanych (PXRD), spektroskopia NMR w ciele stałym (ssNMR), różnicowa kalorymetria skanningowa DSC) oraz metod obliczeniowych (modelowanie molekularne i algorytm genetyczny). Dr Gubica każdą z prac, wchodzących w zestaw dorobku habilitacyjnego omawia osobno artykułując najbardziej istotne elementy o nowatorskim charakterze. Nie widzę więc potrzeby aby w mojej opinii pojawiało się „omówienie omówienia”. Sądzę, że bardziej istotna jest refleksja na temat spraw ogólnych; koncepcji, warsztatu i wniosków wynikających z prowadzonych badań.

Zaprezentowany materiał jest bardzo blisko związany z tematem pracy doktorskiej Habilitanta. Mam wrażenie, że zmieniając otoczenie naukowe dr Gubica nadał zsyntetyzowanym przez siebie obiektom nowe życie. Poprzednio celem była synteza teraz głównym wyzwaniem i przesłaniem są badania strukturalne. Konstatacja ta nie jest elementem wartościującym. Być może był to świadomy wybór Habilitanta by w nowym środowisku znaleźć inne obszary dla swych zainteresowań a jednocześnie wykorzystać swe wcześniejsze doświadczenia.

Centralna Komisja ds. Stopni i Tytułów powołała zespół do przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego dra Gubicy w skład której weszli eksperci reprezentujący różne specjalności związane tematycznie z dysertacją. Każdy z nich z pewnością zwróci uwagę na inne elementy. W mojej opinii skoncentruję się na jakości i innowacyjności badań związanych ze spektroskopią magnetycznego rezonansu jądrowego oraz obliczeń teoretycznych jako narzędzia wspierającego interpretację widm NMR. W każdej z załączonych prac Habilitant omawia wyniki uzyskane w wyniku pomiarów CP/MAS (Cross Polarization Magic Angle Spinnig). Jest to rutynowy i podstawowy eksperyment, jeden z wielu jakie w chwili obecnej znajdują się w bogatej ofercie spektroskopii NMR ciała stałego, techniki która w ostatnich dwóch dekadach jest świadkiem nieprawdopodobnego rozwoju metodologicznego. W wielu pracach powtarza się ten sam scenariusz, wartości izotropowe ^{13}C δ_{iso} w ciele stałym porównywane są z wartościami w roztworze (najczęściej DMSO) a różnica przesunięć chemicznych ($\Delta\delta$) jest podstawą do dyskusji na temat różnic konformacyjnych w cieczy i ciele stałym. Teza, że $\Delta\delta$ jest obiektywną miarą zmian konformacyjnych wydaje mi się dosyć ryzykowna, gdyż nie uwzględnia złożoności systemów w obu stanach skupienia, związanej chociażby z upakowaniem molekularnym w fazie stałej (niekowalencyjne oddziaływania w sieciach krystalicznych) i efektami rozpuszczalników (faza ciekła).

Uważam też, że niektóre kategoryczne stwierdzenia mają cechy nadinterpretacji i zbyt daleko idącego wnioskowania. Dotyczy to m.in. stwierdzenia, że porównanie przesunięć chemicznych pozwala ocenić dynamikę molekularną (praca H1, strona 9 autoreferatu) grup funkcyjnych. Do tego celu służą zupełnie inne narzędzia NMR-owe (pomiar czasu relaksacji, analiza parametrów anizotropowych przesunięcia chemicznego, oddziaływań dipolowych, kwadrupolowych itd.)

W swoich pracach Habilitant chętnie odwołuje się do danych teoretycznych. Parametry ekranowania ^{13}C σ_{iso} obliczone metodą GIAO DFT skorelowane z parametrami ^{13}C δ_{iso} wykorzystuje do przypisań strukturalnych i walidacji rozwiązań. Jest to bardzo popularne i efektywne podejście, po które chętnie sięgają spektroskopiści NMR od blisko dwudziestu lat. Wprowadzenie algorytmu GIAO DFT do pakietu GAUSSIAN spowodowało, że metoda ta stała się ogólnie dostępna i przystępna. Szybko jednak środowisko NMR zajmujące się analizą fazy stałej zorientowało się, że analiza pojedynczej molekuly w oparciu o koordynaty z danych X-ray jest zbyt dużym uproszczeniem i nie uwzględnia efektów sieci krystalicznej. Pojawiły się różne alternatywne rozwiązania, głównie oparte o konstrukcje wirtualnych klastrów imitujących otoczenie niezależnej molekuly. Dr Gubica w swoich pracach pozostaje na wstępnym i wczesnym etapie rozwoju metod obliczeniowych analizując bardzo ograniczony zestaw danych. Dzisiaj standardem w obliczeniach teoretycznych są metody uwzględniające periodyczność sieci krystalicznej. Sugeruję, aby Habilitant zwrócił uwagę na programy typu GIPAW (Gauge Including Projector Augmented Waves).

Najbardziej interesujący i perspektywiczny wydaje mi się wątek związany z próbą przewidzenia struktur krystalicznych badanych związków z wykorzystaniem metod obliczeniowych (prace H6 i H8). Z punktu widzenia wyzwań intelektualnych to jedno z największych przedsięwzięć chemii strukturalnej ciała stałego. Optymalizacja konformacji i znalezienie minimum lokalnego dla izolowanej molekuly optymalizowanej w warunkach próżniowych to ciągle bardzo daleka droga do określenia struktury kryształu (prace 6 i 8). Entuzjazm dra Gubicy i konkluzja, że opracował metodę, „która pozwala zastąpić pomiary XRD za pomocą obliczeń DFT i spektroskopii ssNMR” są zdecydowanie na wyrost (str. 16 podsumowania). Proponuję aby Habilitant spojrzął np. na pracę SL Price, Chem. Soc. Rev., 2014, 43, 2098-2111 i wiele innych, które związane są z problematyką CSP (Crystal Structure Prediction).

Pragnę podkreślić, że opinia oraz dystans do niektórych stwierdzeń i konkluzji poparte moim doświadczeniem i oglądem literatury mają oczywiście charakter subiektywny. Wszystkie prace przedstawione jako materiał habilitacyjny były recenzowane przez niezależnych ekspertów (recenzentów czasopism, Edytorów) i najwyraźniej wizje oraz koncepcje Habilitanta były dla nich przekonujące, skoro zaakceptowali artykuły do publikacji.

Ocena dorobku naukowego i organizacyjnego;

W wymiarze bibliometrycznym dorobek Habilitanta należy uznać za umiarkowany. Jest współautorem 18 prac, 13 artykułów ukazało po doktoracie. Dr Gubica jest pierwszym autorem w 13 publikacjach oraz autorem korespondencyjnym w 9 artykułach. Wyraźne przyspieszenie aktywności publikacyjnej po uzyskaniu stopnia doktora należy zanotować po stronie pozytywów. Sumaryczny współczynnik IF (zgodnie z rokiem opublikowania) wynosi 35,108. Liczba wszystkich/niezależnych cytowań wg bazy Web of Science® to odpowiednio 57/32. Dane te pokazują, że średnio jedna praca była cytowana 1.78 razy co świadczy o niewielkim zainteresowaniu tematyką prezentowaną przez Habilitanta lub, że czas na zainteresowanie jeszcze nie nadszedł. Konsekwencją, jest stosunkowo niski indeks Hirscha: 5 (wg bazy Web of Science®)

W informacjach dydaktycznych i organizacyjnych nie znalazłem żadnych spektakularnych osiągnięć. Dr Gubica robi to co jest obowiązkiem adiunkta: kieruje i sprawuje opiekę nad pracami magisterskimi i licencjackimi, prowadzi zajęcia ze studentami, opracowuje skrypty dla studentów. Ma niewielkie sukcesy grantowe (jeszcze w okresie pracy na Uniwersytecie Warszawskim). Bardzo aktywnie uczestniczy w ruchu popularyzatorskim przygotowując zajęcia dla młodzieży i dorosłych.

Podsumowanie

Po wnikliwym zapoznaniu się z materiałem przedstawionym jako rozprawa habilitacyjna trudno mi ocenić co tak naprawdę jest obszarem ekspertyzy dra Gubicy. Publikacje przedstawione w autoreferacie są interdyscyplinarne i wielowątkowe. Dzisiaj wiele prac powstaje w wyniku interdyscyplinarnej współpracy zespołów specjalistów. Gdybym jednak miał zaprosić Habilitanta do realizacji wspólnego projektu pewnie nie prosiłbym o wsparcie w badaniach X-ray, NMR czy w obliczeniach teoretycznych. Sadzę, że domeną dra Gubicy nadal pozostaje chemia syntetyczna choć nie wykluczam, że się mylę. Myślę, że celowym byłoby spotkanie komisji habilitacyjnej z drem Gubicą aby ocena jego osiągnięć i kompetencji była pełna i nie pozostawiała wątpliwości.

Mimo zastrzeżeń wyartykułowanych wcześniej w mojej opinii stwierdzam, że praca spełnia podstawowe wymogi merytoryczne i formalne stawiane tego typu opracowaniom w Ustawie o stopniach i tytule naukowym z 14 marca 2003 r. (Dz. U.

nr 65, poz 595). Uwzględniając powyższe fakty, wnioskuję o dopuszczenie dra Gubicę do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

A handwritten signature in black ink, appearing to read "M. Pudel". The signature is written in a cursive style with a large initial "M" and a long, sweeping tail.