



INSTYTUT CHEMII ORGANICZNEJ POLSKIEJ AKADEMII NAUK

Prof. Jacek Młynarski
Z-ca Dyrektora ds. Naukowych

01-224 Warszawa
ul. Kasprzaka 44/52
Tel. (22) 343 23 22
Fax.: (22) 632 66 81
jacek.mlynarski@icho.edu.pl

Ocena dorobku i osiągnięcia naukowego dra Andrzeja Nowackiego

Badanie reaktywności i konformacji wybranych pochodnych cukrów z wykorzystaniem metod chemii obliczeniowej

w sprawie przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego

Warszawa, 30 czerwca 2019

Przedstawione, jako podstawa wniosku o nadanie stopnia naukowego osiągnięcie naukowe, zostało opisane tytułem: *Badanie reaktywności i konformacji wybranych pochodnych cukrów z wykorzystaniem metod chemii obliczeniowej*. Zacytowany temat jest bardzo ogólny i, o ile nakreśla obszar badań, to nie precyzuje istoty odkrycia, ani osiągnięcia naukowego. Lektura dołączonych publikacji (H1-H14) oraz autoreferatu Habilitanta pozwala jednak na wyrobienie sobie zdania na temat badań prowadzonych przez dra Nowackiego. Przedstawiony cykl publikacji opisuje zbliżone pod względem metodologii badania, jednak trudno połączyć je w jedno spójne osiągnięcie naukowe. Z tego wynika zapewne wybór zbyt ogólnego tytułu Autoreferatu. Nie wpływa to jednak na możliwość uznania przedstawionych prac za spójny tematycznie cykl publikacji, który zgodnie z przedmiotową ustawą,¹ *powinien dowodzić znacznego wkładu autora w rozwój określonej dyscypliny naukowej* (Art. 16 Ustawy).

Sylwetka naukowa Kandydata. Tematyka związana z syntezą oraz korelacją pomiędzy strukturą a reaktywnością cukrów obecna jest w karierze naukowej dra Andrzeja Nowackiego od czasów wykonywania pracy dyplomowej (1995: *Badania kinetyki reakcji przegrupowania 3,4,6-tri-O-acetylo-1,5-anhydro-2-deoksy-D-arabino-heks-1-enitolu*, promotor prof. Andrzej Wiśniewski). Stopień doktora nauk chemicznych uzyskał w roku 2003 na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego na podstawie rozprawy: *O tworzeniu się i izomeryzacji wybranych glikozydów*. Praca doktorska wykonana była również pod opieką prof. Andrzeja Wiśniewskiego. Z dołączonej informacji o dotychczasowym zatrudnieniu wynika, że przez cały ośmioletni okres pomiędzy pracą dyplomową, a obroną pracy doktorskiej dr Nowacki zatrudniony był jako specjalista naukowo-techniczny. W roku 2004 (rok po obronie pracy doktorskiej) awansowany został na stanowisko adiunkta, na którym pozostaje do dziś. W tym okresie, związany z

¹ Ustawa z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595 ze zm. W Dz. U. z 2005 r., nr 164, poz. 1365, Dz. U. z 2017 r. poz. 1789).

macierzystą grupą i ośrodkiem, prowadził badania, które można określić jako tradycyjnie rozumianą chemią cukrów. Należy odnotować, że nie odbył żadnego stażu naukowego w ośrodku krajowym, ani zagranicznym (Załącznik 4, strona 16). Nie kierował również żadnym grantem badawczym. Ten sam załącznik na stronie 4 wymienia wykonywanie zadania w ramach grantu POiG: *Cukry jako surowce odnawialne w syntezie produktów o wysokiej wartości dodanej* (2010-2014). Zaskakujący jest w tym świetle awans na stanowisko adiunkta – bez doświadczenia ze stażu zagranicznego i środków finansowych na prowadzenie własnych, niezależnych badań. Skutkiem tego jest kontynuowanie badań związanych z tematyką macierzystego zespołu i niewielkie tylko wysiłki w kierunku wykreowania własnego obszaru odkryć.

Na całkowity dorobek publikacyjny Kandydata składają się 32 prace (baza Scopus, Kandydat w Autoreferacie wymienia 30) opublikowane w międzynarodowych czasopismach. W większości są to tytuły o niskim współczynniku oddziaływania (IF ca. 0.5-1.5), chociaż tytuły takie jak *Tetrahedron* czy *Carbohydrate Research* publikują rzetelne badania i nie należy ich lekceważyć. W dorobku dra Nowackiego brakuje prac opublikowanych w opiniotwórczych czasopismach, które jeśli nie chcemy posługiwać się wartościami współczynników oddziaływania, są istotne w przypadku ubiegania się o granty badawcze, ale też wpływają na ocenę parametryczną jednostki w której jest zatrudniony. Baza SCOPUS znajduje 127 cytowań dla tych prac, jednak po odliczeniu autocytowań (wszystkich autorów) pozostaje tylko 61 przywołań opublikowanych prac. Powyżej przytoczone liczby oraz indeks h o wartości 7 określiłbym jako dolną granicę oczekiwań stawianym kandydatom do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego w dyscyplinie chemia. Nie parametry scjentometryczne, rzecz jasna, są kryterium oceny wniosków habilitacyjnych, jednak w tym przypadku muszą zauważyć, że są one proporcjonalne do wartości naukowej prezentowanych prac.

Ocena osiągnięcia naukowego. Czternaście oryginalnych artykułów stanowiących podstawę wniosku (H1-H14) opublikował Autor w latach 2007-2018. W dziesięciu z nich, a więc w większości, dr Andrzej Nowacki jest autorem korespondencyjnym. Nie sposób jednak nie dostrzec, że w nielicznych tylko pracach nie towarzyszą na liście autorów uczeni ze stopniem dra habilitowanego. Ponadto, w pięciu przypadkach oświadczenie współautorki (dr hab. Beata Liberek, prof. UG) stwierdza: „mój udział polegał na zaplanowaniu badań” (H9, H10) lub „mój udział polegał na zaplanowaniu wspólnie z Habilitantem badań” (H12, H13, H14). Te stwierdzenia, wspólnie z analizą tematyki prac pokazują zbytnie przenikanie się wspólnych tematów badawczych wewnątrz zespołu w którym pracuje Habilitant, ale też dowodzą niejednoznacznego przypisania autorstwa tematyki badań.

Współczynniki oddziaływania czasopism, w których opublikowane zostały prace połączone w „cykl habilitacyjny” są podobne do pozostałych prac z dorobku dra Nowackiego. Nieliczne cytowania tych prac w większości stanowią autocytowania (z wyjątkiem kilku prac wymienionych powyżej H12-H14).

Zgodnie ze stwierdzeniem Autora: *przedmiotem czternastu prac stanowiących osiągnięcie habilitacyjne są badania reaktywności i konformacji wybranych pochodnych cukrów z wykorzystaniem metod chemii obliczeniowej, opartych głównie na funkcjonałe gęstości elektronowej (DFT)* (Autoreferat, strona 3). Pierwsze publikacje (H1-H4) dotyczą tworzenia

czwartorzędowych soli amoniowych. Ta tematyka obecna była w Zespole Habilitanta, czego dowodem są liczne publikacje z obszaru syntezy i prognozowania konformacji substratów/produktów. Trudno na tym polu zaproponować innowacyjne badania. Takiej próby nie podejmuje też Habilitant, a przedstawione prace dotyczą prostej transformacji pochodnych *O*-mesylowych tetrahydrofuranu w czwartorzędowe sole amoniowe w reakcji z trzema azotowymi czynnikami nukleofilowymi: trimetyloaminą (**H1**), pirydyną (**H2**), (**H3**) i amoniakiem (**H4**). W kolejnych pracach (**H5**, **H6**) rozważania dotyczyły podobnej reakcji w przypadku zastąpienia mesylanu odchodzącym anionem chlorkowym. W pracy **H7** badany jest usztywniony konformacyjnie mesylan glukofuranozy (oraz inne pochodne furanu i furanozy), zbliżając prace w kierunku cukrów aż do 1,4:3,6-dianhydro-2,5-di-*O*-trifluorometanosulfono-*D*-mannitolu (**H8**). Trzeba przyznać, że Autor poczynił wiele obliczeń i obserwacji badanych związków, a zarówno publikacje, jak i Autoreferat, przedstawiają naukowo poprawnie i beletrystycznie barwnie opisane obliczenia wpływu grupy opuszczającej, zawady sterycznej, konformacji etc. na przebieg reakcji. Nie zagłębiam się jednak w dobór stosowanych metod i narzędzi, bowiem sumarycznie zbadanie przebiegu reakcji wybranych *O*-mesylo- i chlorometylo pochodnych THF oraz cukrów, z trimetyloaminą, pirydyną i amoniakiem, nie dostarcza nam zaskakujących informacji, ani nie podaje nieoczywistych koncepcji. Zgodzić się można, że Autorzy stworzyli *spójny opis przebiegu reakcji tworzenia CSA w układach wieloatomowych, którego dotychczas w literaturze nie było*.

W kolejnych publikacjach (**H9**, **H10** autorka korespondencyjna prof. Beata Liberek oraz **H11**) zaprezentowane zostały badania konformacyjne pięciu wybranych cukrów – 3-azydo-2,3,6,-trideoksyheks-5-enopiranozydów metylu, czterech 3-amino-2,3,6,-trideoksy-L-heksopiranozydów metylu, a także 2-amino-2-deoksy- β -*D*-glukopiranozydu diosgenyłu. Dalej mamy badania konformacyjne 1,2-nienasyconych cukrów (glikali) (**H12**, **H13** autorka korespondencyjna prof. Beata Liberek oraz **H14**). Publikacje z tej ostatniej grupy i zawarte w nich obliczenia konformacji poparte elegancką analizą widm NMR stanowią, moim zdaniem, najciekawszą część wniosku habilitacyjnego. Z uwagi na interesującą reaktywność tej grupy substratów (glikali), ich szerokie zastosowanie w syntezie i często nieprzewidywalną stereoselektywność reakcji, zaprezentowane obserwacje śledziłem z zainteresowaniem. Opisany wpływ zmian struktury podstawnika w pozycji C-5 pierścienia oraz konfiguracji centrów stereogenicznych na stan równowagi konformacyjnej może tłumaczyć wiele faktów eksperymentalnych. Mimo, że nie są to też obserwacje przesadnie zaskakujące, to jednak szkoda, że wnioski nie posłużyły do wykreowania nowego, ciekawego pola badań.

Skrótowo omówione powyżej badania pokazują biegłość Habilitanta w obszarze dość prostych, ale istotnych badań struktury związków. Nie mam uwag do stosowanych metod, wyciąganych wniosków, jednak wynikający z zapisów Ustawy warunek zaistnienia i wykazania istotnego wpływu badań na dyscyplinę nie został spełniony. Nasza wiedza na temat konformacji cząsteczek cukrów nie została istotnie wzbogacona, a światowe badania w tym obszarze dotyczą znacznie bardziej zaawansowanych problemów. Te rzetelnie wykonane badania są zbyt zachowawcze w obszarze nowych koncepcji. Z pewnością miał na to wpływ wspomniany wcześniej brak własnych funduszy na badania i pozostawanie pod wpływem tematyki Zespołu. To zarówno przyczyna, jak negatywny skutek wynikający z tej przyczyny – prowadzenie samodzielnych badań bez grantu NCN lub równoważnego jest obecnie praktycznie niemożliwe, a pozyskanie środków badawczych jest uzależnione od dorobku zebranego uprzednio i dobrej pozycji

naukowej. Kandydat nie zdobył dotychczas żadnego grantu badawczego, a zebrany dorobek może być skromny w kolejnych konkursach grantowych.

Bardzo pozytywnie oceniam **pracę dydaktyczną** dra Andrzeja Nowackiego na I i II stopniu studiów. Bardzo istotne jest docenienie trudu włożonego w promotorstwo licznych prac licencjackich i magisterskich. Zaangażowanie w proces kształcenia poprzez licznie przygotowywane i prowadzone zajęcia dydaktyczne jest dobrze udokumentowane w materiałach i dowodzi ogromnego talentu na tym polu. Obraz ten dopełnia zaangażowanie w popularyzację wiedzy (dni otwarte, zajęcia w szkołach średnich, monografie upowszechniające naukę).

Konkludując, muszę zauważyć, że z przedstawionych materiałów wyłania się niejednoznaczny obraz uczonego-dydaktyka, przy czym ten drugi aspekt wyraźnie przeważa. W ocenie pracy naukowej brakuje mi poszukiwania własnego obszaru badań i zwrócenie się w stronę oryginalnych, autorskich koncepcji. Opublikowanie prac w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym uważam, podobnie jak Ustawodawca, za warunek niewystarczający do uzyskania stopnia doktora habilitowanego. Przedstawione badania odbiegają od kierunku w jakim zmierza współczesna chemia cukrów, chociaż Autor sprawnie posługuje się nowoczesnymi metodami obliczeniowymi. Nie mam zastrzeżeń do całkowitego dorobku dra Nowackiego, ale zaprezentowane osiągnięcie naukowe jest moim zdaniem zbyt skromne na tle obecnego stanu wiedzy. Powyżej przedstawiłem moją ocenę tematyki badawczej, tu nadmienię jeszcze, że publikacje **H1-H9**, o najsilniej udokumentowanym wkładzie koncepcyjnym Habilitanta, uzyskały łącznie mniej niż 10 niezależnych cytowań. W dysonansie z tym obrazem skromnych wyników naukowych pozostaje informacja o bardzo licznych prezentacjach konferencyjnych. W załączniku 4 znajduje się informacja o *wyłoszeniu referatów* na konferencjach międzynarodowych (Autor wymienia 11) oraz krajowych (35). Analiza niektórych pozycji i konfrontacja z materiałami konferencyjnymi pokazuje, że to nie wyłoszone referaty, ale postery i nie zaprezentowane przez Habilitanta, ale innych wymienionych autorów.

Brak istotnych wykładów na zaproszenie, skromna liczba cytowań badań i nieliczne recenzje przygotowane dla czasopism naukowych to również potwierdzenie niewielkiej rozpoznawalności Autora na arenie międzynarodowej. Biorąc pod uwagę powyższą ocenę osiągnięcia naukowego, ale też ocenę oddziaływania prac Autora na rozwój dyscypliny naukowej, nie mogę stwierdzić, że dr Andrzej Nowacki spełnia wymagania stosownej Ustawy w zakresie ubiegania się o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego.

