



UNIwersytet
Warszawski



Warszawa, dn. 8.05.2023

**Recenzja dotycząca wniosku o nadanie Panu Doktorowi Tomaszowi Pawlakowi
stopnia doktora habilitowanego w Dziedzinie Nauk Ścisłych i Przyrodniczych
w Dyscyplinie Nauki Chemiczne**

Dane formalne

Pan dr Tomasz Pawlak ukończył studia wyższe na Wydziale Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika. Tutaj w 2010 roku obronił pracę magisterską pt. „Wpływ budowy związków kompleksowych Pd(II) i Pt(II) z alkilowymi i aryłowymi pochodnymi 2,2'-bipirydyny oraz 1,10-fenantroliny na przesunięcia chemiczne ^1H , ^{13}C i ^{15}N NMR” pod kierunkiem naukowym dr. hab. Leszka Pazderskiego, prof. UMK, otrzymując tytuł magistra. Następnie został zatrudniony w Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk w Łodzi, początkowo na stanowisku chemika (2011), asystenta (2011-2018) a następnie adiunkta (2018-). W 2014 r. ukończył studia podyplomowe z zakresu Rolnictwo-Ogrodnictwo na Wydziale Nauk Przyrodniczych i Technicznych Państwowej Wyższej Szkoły Zawodowej w Skierniewicach. W roku 2016 obronił pracę doktorską pt. „Zastosowanie spektroskopii NMR w cieple stałym i metod obliczeniowych w badaniach nieuporządkowania molekularnego w kryształach peptydów i polimerów syntetycznych”. Praca ta była wykonana pod kierunkiem naukowym prof. dr. hab. Marka J. Potrzebowskiego w CBMiM PAN w Łodzi. Została ona wyróżniona przez Radę Naukową Instytutu oraz wyróżniona nagrodą przez Polskie Towarzystwo Chemiczne (2017). W okresie przed obroną pracy doktorskiej Kandydat odbył cztery krótkoterminowe staże zagraniczne: i) w Central European Institute of Technology na Uniwersytecie Masaryka w Republice Czeskiej (trzymiesięczny pobyt naukowo-badawczy, 2009), ii) w Department of Physics, Martin-Luther University w Halle, RFN (dwa 2-tygodniowe pobyty naukowo-badawcze, 2011 i 2013) oraz iii) w RIKEN Centre for Life Science Technologies w Japonii (miesięczny staż naukowo-badawczy, 2014), zaś po uzyskaniu stopnia doktora roczny staż naukowy w Department of Physics, University of Warwick w Wielkiej Brytanii (2016-2017). Ten ostatni został sfinansowany w ramach programu Mobilność Plus MNiSW. Rozprawa habilitacyjna Pana dr. Tomasza Pawlaka jest poświęcona ważnym zagadnieniom z chemii

Prof. dr hab. Michał K. Cyrański
Pasteura 1
02-093 Warszawa
e-mail: mkc@chem.uw.edu.pl
Tel: 22 55 26 360

strukturalnej z wykorzystaniem krystalografii NMR w badaniach z jednej strony substancji farmaceutycznie aktywnych a z drugiej materiałów funkcjonalnych. To nowoczesna tematyka badawcza o dużym potencjale aplikacyjnym.

Ocena dorobku naukowego

Pan dr Tomasz Pawlak opublikował łącznie 45 prac naukowych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym z określonym współczynnikiem oddziaływania (IF). Wszystkie prace są oryginalne i wieloautorskie. Przeciętna liczba autorów wynosi 4-6, choć w dorobku Habilitanta jest również jedna praca dwuautorska i trzy prace trójautorskie. Duża część prac autora (20) ukazała się po uzyskaniu stopnia doktora, choć Kandydat wlicza również dodatkowo 5 publikacji, które ukazały się w roku poprzedzającym obronę pracy doktorskiej. Rozumiem, że stało się tak prawdopodobnie z powodu odrębności tematycznej podjętych później badań. Pisma, w których ukazały się prace należą do dobrych a nawet bardzo dobrych periodyków naukowych takich jak m.in. *Advanced Materials*, *Chemistry – a European Journal*, czy *Crystal Growth & Design* (5 prac). Sumaryczny *Impact Factor* opublikowanych prac wynosi 191.1 (129.4 po uzyskaniu stopnia doktora), co stanowi średnio ok. 4.2 na pracę. Jest to wynik bardzo dobry. Habilitant nie ma żadnej publikacji monoautorskiej, jednak w ok. $\frac{1}{3}$ prac znajduje się na pierwszej pozycji, zaś w ok. $\frac{1}{6}$ prac jest również autorem korespondencyjnym. Brak oryginalnej pracy monoautorskiej jest zrozumiałe biorąc pod uwagę złożony koncepcyjnie i metodologicznie charakter podejmowanych problemów/zagadnień naukowych, szkoda jednak, że Habilitant nie opublikował żadnej pracy przeglądowej, która mogłaby uwypuklić jego zainteresowania naukowe. Prace Pana dr. Tomasza Pawlaka były cytowane łącznie 607 razy (536 bez autocytowań), zaś indeks Hirscha wynosi $H=16$. Jest to bardzo dobry wynik, który wskazuje na znaczący wpływ Jego prac na rozwój Nauki. Choć Kandydat nie wskazał tego w materiałach posiada on 13 prac, które są cytowane ponad 20 razy, przy czym najlepiej jego cytowana praca (*Journal of Magnetic Resonance*, 2013) ma w chwili obecnej 53 cytowania. Jest to bardzo dobry wynik.

Dr Tomasz Pawlak przedstawiał wyniki swoich badań w formie 34 wystąpień konferencyjnych z czego 19 stanowiło komunikaty ustne na konferencjach o zasięgu krajowym i międzynarodowym. Aktywność Habilitanta na polu związanym ze zdobywaniem funduszy na badania naukowe w ramach otwartych konkursów jest również znacząca. W latach 2018-2022 był kierownikiem grantu Homing FNP, zaś a latach 2011-2014 kierował grantem Preludium NCN. Warto również nadmienić iż trzykrotnie był wykonawcą projektów naukowych, w tym w dwukrotnie Opus NCN (2011-2014 oraz 2015-2016). Oprócz tego uzyskał finansowanie podoktorskiego stażu zagranicznego w ramach projektu Mobilność Plus, MNiSW (2016-2017) zaś wcześniej miesięcznego stażu w Japonii w ramach stypendium Start FNP (2014).

Za działalność naukową był nagradzany szeregiem nagród, stypendiów i wyróżnień. Najważniejsze z nich to dwukrotnie stypendium START FNP (2014 oraz

2015), stypendium Ministra Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców (2013). Ostatnio jego praca (*Crystal Growth&Design*, 2021) została wyróżniona tytułem „Polskiego Diamentu Krystalograficznego” przez Komitet Krystalografii PAN (2022). Kończąc tę część oceny rozprawy warto zauważyć, że Habilitant był proszony o recenzowanie prac naukowych nadsyłanych do Edytorów ważnych czasopism z jego dyscypliny - *Organic Chemistry Frontiers*, *Crystal Growth & Design*, *Spectroscopy Letters*, *Macromolecules* oraz *Chemistry*. Łącznie wykonanych recenzji było 8. Wskazuje to na uznanie jego kompetencji przez naukowe instytucje zewnętrzne. W podsumowaniu tej części stwierdzam, iż zarówno całkowity dorobek publikacyjny Habilitanta jak i związana z nim aktywność naukowa jest na dobrym/bardzo dobrym poziomie.

Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej

Tytuł osiągnięcia naukowego brzmi: „Krystalografia NMR jako uniwersalne narzędzie badań form krystalicznych na przykładzie leków i materiałów funkcjonalnych”. Na rozprawę składa się cykl 6 monotematycznych publikacji naukowych opublikowanych w latach 2016-2022. Są to prace oryginalne, opublikowane w dobrych/bardzo dobrych czasopismach naukowych – dwie prace w *Crystal Growth & Design* (**H1**, **H2**, **H3**, IF=4.1), po jednej pracy *Materials* (**H4**, IF=3,75), *Molecular Pharmaceutics* (**H5**, IF=5.36) oraz *Solid State Nuclear Magnetic Resonance* (**H6**, IF=2.81). Wszystkie publikacje są wieloautorskie a liczba współautorów waha się w granicach 3-11. Współautorzy złożyli wyczerpujące oświadczenia, które są uzupełniające w stosunku do zakresu pracy dr. Tomasza Pawlaka. We wszystkich pracach (poza **H1**) Habilitant jest autorem pierwszym i korespondencyjnym. Jedynie w pracy **H1** Kandydat jest drugim współautorem, o równorzędnym wkładzie z pierwszym autorem. Choć oświadczenia współautorów wskazują na ich znaczący udział, udział Habilitanta jest dominujący w zakresie ujętym wnioskiem habilitacyjnym. Pierwsze dwie prace [**H1**, **H2**] poświęcone są niecyklicznym i cyklicznym układom organicznym na bazie steroidów hekogeniny i botogeniny, które mogą stanowić silniki molekularne. Dotyczy to w szczególności układów analizowanych w drugiej z prac [**H2**], gdzie centralny fragment fenyłowy podstawiony jest atomami fluoru. Dużą wartością pracy [**H1**] było znalezienie rozpuszczalnika w strukturze związku 11E stosując metodologię badań krystalografii NMR wychodząc z bardzo słabej jakości danych dyfrakcyjnych. Integralną częścią badań było wykonanie dynamiki molekularnej, kluczowej dla określenia funkcjonalności tych układów. Praca **H2** jest niezwykle interesującym rozwinięciem pracy **H1**, ważnym z punktu widzenia możliwości zastosowania ich jako maszyn molekularnych. Oprócz wpływu podstawnika w pierścieniu fenyłowym bardzo duży wpływ na właściwości układów ma rozpuszczalnik, który jest ważnym elementem sieci krystalicznej. Habilitant przedstawił bardzo cenne analizy dotyczące przejść pomiędzy formami solwatomorficznymi korelując migrację rozpuszczalnika w badanych układach ze zmianami parametrów strukturalnych a w szczególności tymi które są związane z dynamiką rotora. W mojej ocenie warto byłoby poszerzyć te badania również o analizy kalorymetryczne, tak jak to ma miejsce

w przypadku kolejnych prac Habilitanta. Kolejne prace **H3-H6** dotyczą układów o znaczeniu farmaceutycznym. Praca **H3** dotyczy badania teriflunomidu, ważnej substancji aktywnej używanej w terapii stwardnienia rozsianego. Wychodząc z analizy widm NMR Habilitant wykazuje i opisuje przejście fazowe pomiędzy formą nisko i wysokotemperaturową tego związku. Zmiana strukturalna jest niewielka. Przejściu fazowemu nie towarzyszy zmiana grupy przestrzennej a jedynie rotacja pierścienia fenylowego w strukturze kryształu. Habilitant rozwinął ten wątek. Korzystając z metod CSP (Crystal Structure Prediction) uwzględniając metodę DFT z poprawkami na dyspersję dokonał opisu krajobrazu energii krystalicznej polimorfów teriflunomidu. Na drodze obliczeń teoretycznych wykazał, iż jest bardzo mało prawdopodobne otrzymanie innych form strukturalnych niż przez niego opisanych. To ważny wniosek. Ponieważ teriflunomid słabo rozpuszcza się w wodzie ciekawym rozwinięciem analiz mogłoby być poszukiwanie jego solwatów. Jednak Habilitant wybrał inną ścieżkę w kierunku syntezy i charakterystyki strukturalnej soli tego układu z metalami IA grupy układu okresowego (litu, sodu, potasu, rubidu oraz cezu), a także z jonem amonowym. Były one przedmiotem analiz pracy **H6**. Wszystkie otrzymane sole charakteryzują się znacznym wzrostem rozpuszczalności w wodzie w porównaniu z układem wyjściowym. Na podstawie znajomości struktury molekularnej trzech soli Habilitant zaproponował budowę soli litowej, dla której nie było możliwe uzyskanie odpowiedniego monokryształu do badań dyfrakcyjnych. Wartość pracy związana jest również z analizą konformacyjną szkieletu teriflunomidu. Praca **H4** dotyczy kolejnego związku, który może być stosowany w przypadku leczenia demencji: N-[3-[4-(6-fluoro-1,2-benzoxazol-3-yl)piperidin-1-yl]propyl]-3-methylbenzenesulfonamidu oraz jego chlorowodoru. Pogłębiona analiza wykazała, iż pomimo zmian konformacyjnych zasadniczo układ wiązań wodorowych determinujących uporządkowanie dalekiego zasięgu jest w obu układach do siebie zbliżony. Habilitant wykazał, iż układ ten nie charakteryzuje się znaczącą dynamiką molekularną i nie ulega przemianom polimorficznym, które są niepożądane z punktu widzenia zastosowań. Co do tej tezy można by polemizować, ponieważ w ogólności ze względu na zróżnicowaną stabilność odmiany polimorficzne mogą mieć różne charakterystyki związane z przyswajalnością, wchłanianiem etc. Również praca **H5** przedstawia bardzo interesujące wyniki otrzymane tym razem dla soli mesylowej safinamidu, która jest substancją czynną leku Xadago, stosowanego w terapii choroby Parkinsona. Analiza Habilitanta ujawnia wiele subtelności – m.in. występowanie odmian polimorficznych, których struktury są określone z użyciem danych dyfrakcyjnych z dyfrakcji proszkowej. W pełni podzielam pogląd, iż stanowiło to dużo większe wyzwanie niż w przypadku korzystania z dyfrakcji promieni rentgenowskich na monokryształy. W mojej ocenie to bardzo znacząca praca która nie tylko analizuje strukturę w ciele stałym, ale również jej dynamikę i przejścia fazowe przy użyciu technik kalorymetrycznych DSC/TGA.

Choć autorowi udało się stworzyć interesujące dzieło naukowe moje zasadnicze wątpliwości dotyczą zarówno jego spójności jak i wagi/zakresu/znaczenia uzyskanych wyników, ponieważ zgodnie z obowiązującą ustawą osiągnięcia powinny stanowić znaczny

wkład w rozwój dyscypliny. Przedmiotem osiągnięcia są dwie grupy ważnych, aczkolwiek bardzo zróżnicowanych układów chemicznych - o znaczeniu farmaceutycznym oraz potencjalnych zastosowaniach w elektronice molekularnej. Tytuł osiągnięcia zawiera zresztą te dwie klasy jako egzemplifikujące podejście metodologiczne, które stanowi narzędzie badawcze. Jak definiuje Habilitant jego celem było wykorzystanie synergii spektroskopii NMR w ciele stałym (bardzo różnych technik), dyfrakcji rentgenowskiej (zarówno na monokryształach jak i na materiale proszkowym) oraz metod obliczeniowych (z uwzględnieniem periodyczności układu, obliczeń dla izolowanych molekuł, obliczeń parametrów magnetycznych, dynamiki molekularnej etc) w badaniach strukturalnych układów krystalicznych dla pełniejszego zrozumienia relacji pomiędzy ich budową a właściwościami. W mojej ocenie rozwój metodologii badawczej jest raczej umiarkowany, podporządkowany konkretnym problemom naukowym każdej z prac. Nie podważa to mojego głębokiego przekonania, iż Habilitant jest wysokiej klasy specjalistą z zakresu wielu nowoczesnych technik badawczych/obliczeniowych i ich twórczej kombinacji. Uznając jednak kryterium spójności tematycznej za spełnione druga duża moja wątpliwość dotyczy zakresu podjętych badań/problemów i uzyskanych wyników w kontekście wkładu Habilitanta jako samodzielnego pracownika naukowego, którym ma zostać. Choć uważam, iż powinien być on większy, jednak po wnikliwej a zarazem możliwie rzetelnej analizie dostępnego mi materiału, wskazane osiągnięcie naukowe jestem skłonny uznać za znaczny wkład w rozwój dyscypliny, w szczególności mając na uwadze duże i w mojej ocenie bardzo wartościowe pozostałe osiągnięcia Habilitanta w zakresie badań strukturalnych. Problemy podjęte przez dr. Tomasza Pawlaka są ważne zaś jego wkład w rozwijanie podejścia metodologicznego jest istotny. Uznaję zatem zapisy art. 219 ust. 1 pkt 2b oraz art. 219 ust. 2 obowiązującej ustawy za spełnione.

Biorąc pod uwagę staże zagraniczne – roczny staż naukowy w Department of Physics, University of Warwick w Wielkiej Brytanii (2016-2017), jak również wcześniejsze krótkoterminowe pobyty zagraniczne: na Uniwersytecie Masaryka w Republice Czeskiej Uniwersytecie Marcina Lutra w RFN oraz w RIKEN Centre for Life Science Technologies w Japonii i powstałe we współpracy publikacje naukowe (trzy prace opublikowane wraz ze współautorami z Uniwersytetu w Warwick [2019, 2021, 2022] jak również trzy prace ko-afiliowane/afiliowane adresem Uniwersytetu Masaryka [2011, 2014, 2015]), warunek istotnej aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej instytucji naukowej, zgodnie z art. 219 ust. 1 punkt 3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce jest spełniony z nadatkiem.

Ocena działalności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzującej naukę

W jednostce, w której zatrudniony jest Habilitant dydaktyka nie stanowi priorytetu działalności, dlatego trudno jest oczekiwać znaczącej działalności na tym polu. Tym nie mniej ma on pewne doświadczenie związane z opieką naukową studentek w ramach realizacji grantu Homing FNP, którego był kierownikiem. Niestety nie przedstawił on bardziej

szczegółowych informacji dotyczących tej opieki. Kandydat nie wykazał również działalności organizacyjnej na rzecz swojej Jednostki, choć za taką można uznać otrzymanie grantu FNP. Myślę że po uzyskaniu stopnia doktora habilitowanego ta aktywność ulegnie wzmocnieniu. Warto nadmienić iż Habilitant jest członkiem Polskiego Towarzystwa Chemicznego (od 2007 roku), oraz członkiem International Society of Magnetic Resonance (od 2013 roku). Biorąc pod uwagę zainteresowania badawcze oraz doświadczenie Kandydata uważam że powinien się on zaangażować w działalność popularyzującą naukę np. w ramach wykładów organizowanych przez Łódzki Oddział PTCh bądź w ramach Festiwalu Nauki, Techniki i Sztuki w Łodzi. Podsumowując: uważam że aktywność Kandydata na tym polu jest zauważalna.

Konkluzja

Po dokonaniu całościowej analizy zarówno osiągnięcia naukowego i całkowitego dorobku naukowego Pana dr Tomasza Pawlaka, jak również Jego dodatkowej działalności, stwierdzam, że spełnia On wymagania określone w artykule 219. ust. 1 i ust. 2 ustawy z dn. 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce (z późniejszymi zmianami). W związku z powyższym popieram wniosek Pana dr. Tomasza Pawlaka o nadanie Mu stopnia doktora habilitowanego w Dziedzinie Nauk Ścisłych i Przyrodniczych w Dyscyplinie Nauki Chemiczne.



Michał K. Cyrański