

Dr hab. Zbigniew Kaczyński
profesor Uniwersytetu Gdańskiego

Gdańsk, 10 maja, 2023 r.

Recenzja

dorobku naukowego dr. Tomasza Pawlaka w związku z postępowaniem
o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego

Recenzja została przygotowana w związku z uchwałą Rady Naukowej Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk w Łodzi, Nr 05/153/2023 z dnia 20 lutego 2023 r., dotyczącą powołania komisji w postępowaniu habilitacyjnym dr. Tomasza Pawlaka, wszczętym w dniu 27 września 2022 r. w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.

Ocena osiągnięć naukowych oraz aktywności naukowej dr. Tomasza Pawlaka została sporządzona na podstawie art. 221 ust. 8 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. 2018, poz. 1668, z późniejszymi zmianami). Stosownie do wymagań określonych w art. 221 ust. 8 ustawy przedmiotem recenzji była ocena czy osiągnięcia naukowe przedstawione przez dr. Tomasza Pawlaka odpowiadają wymaganiom określonym w art. 219 ust. 1 pkt 2., stanowiąc znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne. Ponadto oceniono aktywność naukową w rozumieniu art. 219 ust. 1 pkt 3. ustawy.

I. Sylwetka Kandydata

Dr Tomasz Pawlak ukończył studia licencjackie w 2008 r. na Wydziale Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu, broniąc pracę licencjacką pt. „Przesunięcia koordynacyjne ^1H NMR w chlorkowych kompleksach Au(III) i Pd(II) z dimetylowymi pochodnymi pirydyny”, przygotowaną pod opieką promotora dr. hab. Leszka Pazderskiego prof. UMK. W roku 2010 uzyskał na tym samym wydziale tytuł zawodowy magistra za pracę 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”, przygotowaną również pod opieką dr. hab. Leszka Pazderskiego prof. UMK. Swoje zainteresowania naukowe, związane z wykorzystaniem spektroskopii NMR, kontynuował w Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk

w Łodzi, gdzie w 2016 roku nadano mu stopień doktora nauk chemicznych, za rozprawę doktorską pt. „Zastosowanie spektroskopii NMR w ciele stałym i metod obliczeniowych w badaniach nieuporządkowania molekularnego w kryształach peptydów i polimerów syntetycznych”, przygotowaną pod opieką prof. dr hab. Marka Potrzebowskiego. Dr Tomasz Pawlak od 2011 r. zatrudniony jest w CBMiM PAN, najpierw na stanowisku chemika, później asystenta, a od 2018 r. na stanowisku adiunkta.

II. Ocena osiągnięcia naukowego

Dr Tomasz Pawlak jako osiągnięcie naukowe będące podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego, zgodnie z art. 219 ust. 1 pkt 2 lit. b) ustawy, wskazał cykl powiązanych tematycznie artykułów opublikowanych w czasopismach naukowych, które w roku opublikowania w ostatecznej formie, były ujęte w wykazie sporządzonym zgodnie z przepisami wydanymi na podstawie art. 267 ust. 2 pkt 2 lit. b) ustawy.

Osiągnięcie naukowe zatytułowane „Krystalografia NMR jako uniwersalne narzędzie badań form krystalicznych na przykładzie leków i materiałów funkcjonalnych” stanowi cykl 6 artykułów naukowych opublikowanych w latach 2016-2022 w recenzowanych czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym, klasyfikowanych w bazie JCR (3 artykuły w Crystal Growth & Design (IF-4,010) i po jednym artykule w Molecular Pharmaceutics (IF-5,364), Solid State Nuclear Magnetic Resonance (IF-2,812) i Materials(IF-3,748)). Sumaryczny IF dla wszystkich prac wyniósł ~24.

W pięciu publikacjach (H2-H6) Habilitant jest autorem pierwszym, a jednocześnie korespondencyjnym, natomiast w jednej (H1) – drugim autorem (w równej kontrybucji z pierwszym autorem). Jego udział w powstaniu prac obejmował m.in. zaplanowanie i przeprowadzenie krystalizacji oraz przemian fazowych badanych obiektów, zaplanowanie, przeprowadzenie oraz analizę wyników zdecydowanej większości pomiarów NMR w ciele stałym, w tym przeprowadzenie procedury przypisania sygnałów oraz analizę dynamiki molekularnej, a także zaplanowanie, przeprowadzenie oraz analizę wyników obliczeń kwantowo-chemicznych. W pracach H2-H6 napisał większość każdego manuskryptu i przygotował rysunki. Biorąc pod uwagę oświadczenia wszystkich współautorów rola Habilitanta w powstaniu prac była wiodąca, zwłaszcza w zakresie badań strukturalnych za pomocą spektroskopii NMR w ciele stałym oraz obliczeń kwantowo-mechanicznych.

Oceniany cykl artykułów stanowi spójną tematycznie całość poświęconą wykorzystaniu krystalografii NMR do badań strukturalnych układów krystalicznych w celu lepszego zrozumienia relacji pomiędzy ich budową a właściwościami. Badaniom poddano dwie odmienne grupy struktur modelowych: materiały funkcjonalne (cykliczne oraz acykliczne rotory molekularne zbudowane

z pochodnych steroidowych i 1,4-dietynylofenylu albo 1,4-dietynyl-2,3-difluoro-fenylu [H1,H2]) oraz produkty farmaceutyczne (m.in. teriflunomid, N-[3-[4-(6-fluoro-1,2-benzoxazol-3-yl)piperidin-1-yl]propyl]-3-methylbenzenesulfonamid i sól mesylowa safinamidu [H3-H6]).

Za podstawowe osiągnięcie Habilitanta uważam zaplanowanie i skuteczne przeprowadzenie badań, w wyniku których rozwiązano szereg problemów strukturalnych i zaproponowano kilka wariantów podejść metodologicznych w obrębie krystalografii NMR, mogących z powodzeniem znaleźć zastosowanie w podobnego typu analizach w przyszłości.

Z bardziej szczegółowych osiągnięć należy wymienić:

- opracowanie procedur krystalografii NMR do opisu przebiegu odwracalnych i nieodwracalnych przemian fazowych, które zostały m.in. wykorzystane do udowodnienia występowania nieudokumentowanych wcześniej przemian fazowych dla komercyjnie dostępnych leków,
- zaproponowanie rozwiązań metodologicznych na potrzeby badań kryształów molekularnych solwatów i ich przemian oraz opisu procesu dehydratacji w strukturze soli mesylowej safinamidu z wykorzystaniem spektroskopii NMR w ciele stałym, PXRD i obliczeń kwantowo-chemicznych,
- wykazanie, że w ramach synergii metodologii krystalografii NMR i procedur komputerowego przewidywania struktur krystalicznych (rozszerzonych przez Habilitanta) możliwa jest wiarygodna ocena szans otrzymania nowych form polimorficznych wraz z eksperymentalną weryfikacją teoretycznych założeń,
- opisanie cech strukturalnych nieznanymi wcześniej form krystalicznych związków z wykorzystaniem procedur krystalografii NMR, dla których nie było możliwe zaproponowanie rozwiązań strukturalnych innymi technikami.
- wykorzystanie informacji na temat dynamiki molekularnej w ramach krystalografii NMR jako źródła więzów strukturalnych, w tym dotyczących swobody konformacyjnej.

Przedstawione osiągnięcie naukowe, w mojej opinii, ma kilka słabych punktów.

- Tytuł osiągnięcia naukowego nie „definiuje osiągnięcia”. Przypomina raczej tytuł monografii, złożonej z różnych rozdziałów, których wspólnym mianownikiem jest wykorzystanie krystalografii NMR.
- W podsumowaniu autoreferatu Habilitant wymienia aż 11 osiągnięć naukowych, które odnoszą się do konkretnych publikacji. Zdecydowanie brakuje sformułowania 2-3, może 4 osiągnięć „ponadpublikacyjnych”, odnoszących się do SPÓJNEGO CYKLU. Rzeczywiście najnowsza

interpretacja wymogów ustawowych mówi o osiągnięciach naukowych, a nie jednym osiągnięciu, ale nigdzie nie jest powiedziane, że ich liczba przekłada się na jakość.

- Kandydat w autoreferacie bardzo szczegółowo opisuje wyniki opublikowane w poszczególnych artykułach. Oczywiście stanowi to pewne ułatwienie dla recenzentów. Jednak jak dla mnie zdecydowanie brakuje szczegółowego opisu wspomnianych powyżej „ponadpublikacyjnych” osiągnięć, zamiast streszczenia publikacji (dołączonych do wniosku).
- Na stronie 10 pojawia się dosyć zagadkowe sformułowanie: „Moje osiągnięcia składały się z szeregu celów szczegółowych...”. Zapewne jest to błąd językowy, ale sugerujący niepotrzebne „tworzenie” tzw. celów szczegółowych badań na podstawie już wcześniej sformułowanych osiągnięć.
- Po zapoznaniu się z całym dorobkiem naukowym Kandydata pojawił się pewien niedosyt dotyczący osiągnięcia habilitacyjnego na tle doskonałego dorobku przed uzyskaniem stopnia doktora. Przejawia się on m.in. w liczbie artykułów wchodzących w skład cyklu, jak i w doborze czasopism, w których opublikowano wyniki. Są to dobre, ale co wymaga podkreślenia, nie topowe czasopisma naukowe. Ich pozycja w zestawieniach WoS, na podstawie tzw. uśrednionych percentyli, to QII. Lepiej notowany jest Crystal Growth & Design, który w kategorii krystalografia klasyfikowany jest w QI (83 percentyl).

Podsumowując moją ocenę osiągnięcia naukowego, uważam, że pomimo pewnych wątpliwości, spełnia ono warunek ustawy, tzn. stanowi znaczny wkładu w rozwój dyscypliny.

III. Ocena aktywności naukowej, o którym mowa w art. 219 ust. 1 pkt 3

1. Publikacje naukowe

Dr Tomasz Pawlak jest współautorem 45 prac naukowych, z czego 25 po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Sumaryczny IF z okresu całej działalności naukowej wynosi 191 (po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych - 129), liczba cytowań – 607 (536 bez autocytowań), a indeks Hirscha 16. Na dzień sporządzania recenzji (8.05.2023) liczba cytowań wg. Scopusa wynosiła 663, a indeks Hirscha 17. Biorąc pod uwagę wskaźniki bibliometryczne całkowity dorobek Kandydata zasługuje na ocenę bardzo dobrą, a dorobek poprzedzający uzyskania stopnia doktora nawet na ocenę wyróżniającą.

2. Realizacja projektów badawczych, udział w konferencjach naukowych, recenzowanie prac naukowych

Doktor Tomasz Pawlak po uzyskaniu stopnia doktora kierował grantem Homing (FNP, 2018-2020) pt. „NMR Crystallography as the state-of-art tool for insight into structural properties of active pharmaceutical ingredients and their formulations – Innovative methodology to improve the quality

of medical products". Przed uzyskaniem stopnia doktora kierował grantem Preludium (NCN) pt. „Korelacje pomiędzy eksperymentalnymi i teoretycznymi parametrami NMR w uporządkowanych/ nieuporządkowanych kryształach molekularnych wybranych peptydów opioidowych". Był także wykonawcą w dwóch grantach OPUS (NCN) oraz w projekcie w ramach programu operacyjnego innowacyjna gospodarka.

Kandydat dosyć aktywnie brał udział w krajowych i międzynarodowych konferencjach naukowych. Po uzyskaniu stopnia doktora uczestniczył w 11 konferencjach (w tym 3 zagranicznych), na których wygłosił 5 prezentacji ustnych. Przed uzyskaniem stopnia doktora brał udział w 21 konferencjach, na których wygłosił 14 prezentacji ustnych (w tym dwie na zaproszenie – podczas EUROMAR 2014 w Zurichu oraz Spotkania polskich użytkowników programu Accelrys w Warszawie w 2014 r. Niestety z zamieszczonych w dokumentacji zestawień nie wynika, czy we wszystkich posterach/wystąpieniach Kandydat był „głównym”, prezentującym autorem, czy tylko jednym ze współautorów.

Habilitant w latach 2014-21 zrecenzował 8 artykułów naukowych w czasopismach z listy JCR.

Na podkreślenie zasługują również liczne nagrody i stypendia, których laureatem jest Kandydat. Zaskakujący jest jednak fakt, że oprócz nagrody Komitetu Krystalografii PAN (2022) „Polskie Diamenty Krystalograficzne” za wyróżniającą się pracę krystalograficzną (Pawlak et. al. Crystal Growth & Design, 2021), pozostałe wyróżnienia związane są z działalnością naukową w okresie przygotowywania pracy doktorskiej. Do najważniejszych należą: niezwykle prestiżowe Stypendia START (FNP; 2014 i 2015), Nagroda Polskiego Towarzystwa Chemicznego za Wyróżnioną Pracę Doktorską (2017) oraz Stypendium MSWiN dla wybitnych młodych naukowców (2013).

Wszystkie wymienione powyżej aktywności zasługują na ocenę bardzo dobrą;

3. Aktywność naukowa realizowana w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej w szczególności zagranicznej

Dr Tomasz Pawlak odbył roczny staż naukowy (03.2016 – 03.2017) w ramach stypendium Mobilność Plus (MNiSW) na Wydziale Fizyki Uniwersytetu w Warwick (Wielka Brytania) w grupie Solid State NMR kierowanej przez prof. Stevena Browna. Wynikiem stażu było współautorstwo publikacji “Venâncio, T.; Oliveira, L. M.; Pawlak, T.; Ellena, J.; Boechat, N.; Brown, S. P. The Use of Variable Temperature ¹³C Solid-State MAS NMR and GIPAW DFT Calculations to Explore the Dynamics of Diethylcarbamide Citrate. *Magn Reson Chem* 2019, 57 (5), 200–210”. Ponadto kandydat przed uzyskaniem stopnia doktora odbył w 2014 r. miesięczny staż naukowy w ramach stypendium Start (FNP) w Japonii, w Advance Solid-State NMR Unit, RIKEN CLST-JEOL Collaboration Centre, RIKEN Centre for Life Science Technologies oraz trzymiesięczny (09.2009 – 12.2009) pobyt

naukowy w ramach programu Erasmus w Centralnym Europejskim Instytucie Technologii w Uniwersytecie Masaryka (Czechy).

Wymienione staże, wraz z publikacją afiliowaną przy Wydziale Fizyki Uniwersytetu w Warwick, jednoznacznie świadczą o spełnieniu ustawowego wymogu aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej w szczególności zagranicznej.

4. Inne formy aktywności naukowej w tym osiągnięcia dydaktyczne, organizacyjne oraz popularyzujące naukę

Do działalności naukowej należy nie tylko prowadzenie badań naukowych, ale także kształcenie kadr naukowych i zawodowych, a także szeroko rozumiane organizowanie i popularyzowanie nauki. O ile działalność dydaktyczna w jednostce PAN, ze względu na specyfikę organizacyjną, może być utrudniona, a jej przejawem może być tylko opieka naukowa nad dwoma studentkami w ramach realizacji własnego grantu Homing FNP, o tyle brak jakichkolwiek osiągnięć organizacyjnych i popularyzujących naukę jest mocno zastanawiający.

Wniosek końcowy

W podsumowaniu stwierdzam, że dr Tomasz Pawlak **spełnia wymagania ustawowe stawiane osobom ubiegającym się o nadanie stopnia doktora habilitowanego**. Przedstawiony do oceny cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych pt. „Krytalografia NMR jako uniwersalne narzędzie badań form krystalicznych na przykładzie leków i materiałów funkcjonalnych”, opublikowanych w czasopismach naukowych z tzw. listy JCR oraz pozostały dorobek naukowy dr Tomasza Pawlaka, stanowią znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne, w rozumieniu art. 219 ust. 1 pkt 2 ustawy - z dnia 20 lipca 2018 r. - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. Ponadto dr Tomasz Pawlak, odbywając roczny staż zagraniczny, **wykazał się istotną aktywnością naukową realizowaną poza macierzystą uczelnią** w rozumieniu art. 219 ust. 1 pkt 3 ustawy.

W związku z powyższym wnioskuję o nadanie dr Tomaszowi Pawlakowi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.