



Warszawa, 23.01.2019

Prof. dr hab. Michał Jaszunski
Instytut Chemii Organicznej PAN
michal.jaszunski@icho.edu.pl

Ocena dorobku dr hab. Małgorzaty Brody

na podstawie dokumentacji dołączonej do wniosku o nadanie tytułu profesora w dziedzinie nauk chemicznych

Dr hab. Małgorzata Broda rozpoczęła karierę naukową na Uniwersytecie Wrocławskim. Po ukończeniu studiów w 1982 r. została zatrudniona w zespole prof. Jerzego P. Hawranka w Zakładzie Chemii Fizycznej. Prof. Hawranek był także promotorem jej pracy doktorskiej, zatytułowanej „*Relaksacja oscylacyjna w halogenofenolach*”, obronionej na Uniwersytecie Wrocławskim w 1990 r.

Od 1993 r. dr hab. M. Broda jest związana z Uniwersytetem Opolskim. W 2008 r., po opublikowaniu 18 prac, wykonanych w Katedrze Chemii Organicznej (kierowanej przez prof. Barbarę Rzeszotarską), przedstawiła rozprawę habilitacyjną pt. „*Stereoelektronowe właściwości pochodnych α,β -dehydroaminokwasów*” i w 2009 uzyskała (nadany przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego) stopień doktora habilitowanego nauk chemicznych ze specjalnością chemia fizyczna i teoretyczna. Od 2011 r. dr hab. M Broda jest zatrudniona na Uniwersytecie Opolskim na stanowisku profesora.

Dr hab. Małgorzata Broda jest autorką 69 prac, w tym 39 wykonanych po uzyskaniu stopnia doktora habilitowanego, opublikowanych w prestiżowych międzynarodowych czasopismach (m.in. *Journal of Peptide Science*, *Journal of Molecular Modeling*,

Biopolymers). Jej prace były cytowane prawie 600 razy, a indeks Hirscha wynosi 14. Kilka publikacji jest wynikiem współpracy z ośrodkami zagranicznymi, a obecnie dr hab. M. Broda uczestniczy w drugim już polsko-austriackim projekcie badawczym. W ramach współpracy z Tatung University (Taipei, Tajwan) brała udział w organizacji trzech międzynarodowych konferencji (dwie w Opolu, jedna w Taipei).

Podstawowym nurtem badań dr hab. Małgorzaty Brody jest analiza konformacyjna peptydów metodami teoretycznymi i spektroskopowymi. Obiektem tych badań są przede wszystkim peptydy, α,β -dehydropeptydy, N-metylowane peptydy i związki, w których wiązanie peptydowe zastąpiono pierścieniem heterocyklicznym zawierającym azot. W teoretycznych badaniach kilkudziesięciu tego typu modelowych związków dr hab. M. Broda stosuje przede wszystkim metody teorii funkcjonału gęstości (DFT) ze standardowym funkcjonałem B3LYP, znacznie nowszym funkcjonałem M06-2X oraz jedyną dającą się zastosować w praktyce dla takiego typu związków metodę *ab initio* - MP2. Według mnie użycie bardziej zaawansowanych metod chemii kwantowej w obliczeniach dla związków tej wielkości jest obecnie niewykonalne, zwłaszcza jeśli uwzględnia się w modelu obecność rozpuszczalnika.

W wielu publikacjach (m.in. wspólnych z dr. hab. D. Siodłakiem) poza metodami chemii kwantowej zastosowane zostały także metody spektroskopii w podczerwieni i rezonansu magnetycznego oraz dyfraktometria rentgenowska. Ważnym elementem tych publikacji jest porównanie uzyskanych wyników teoretycznych i doświadczalnych, umożliwiające niejednokrotnie weryfikację obliczeń i interpretację widm. Przedstawione wyniki świadczą w wielu przypadkach o istotnym wpływie rozpuszczalnika, zwłaszcza polarnego, na konformację. Cenna jest także interpretacja wyników, wykazująca zależność konformacji od wewnątrzcząsteczkowych oddziaływań dipolowych i wiązań wodorowych.

Badana w wyżej wymienionych publikacjach energia modelowych związków z nietypową resztą aminokwasową jest najczęściej funkcją dwóch kątów torsyjnych i może być przedstawiona poprzez wykres Ramachandrana. Określenie metodami analizy

konformacyjnej położenia minimów nie jest jednak jedynym rezultatem tych prac; nawet ciekawsze i ważniejsze bowiem jest to, że na podstawie uzyskanych wyników można również przewidywać drugorzędową strukturę odpowiednich peptydów i opisać ich oddziaływanie z otoczeniem.

Na uwagę zasługuje także seria prac wykonanych po habilitacji (wspólnie z dr hab. T. Kupką), poświęconych molekularnym własnościom magnetycznym - przede wszystkim parametrom widma rezonansu magnetycznego. W tych publikacjach porównanie wyników DFT ze znacznie dokładniejszymi wynikami *ab initio* pozwoliło ocenić rolę stosowanych w DFT przybliżeń, m.in. dzięki zastosowanej ekstrapolacji do granicy bazy zupełnej. Aromatyczność badanych związków została oceniona poprzez kwantowochemiczną analizę molekularnych własności magnetycznych (indeksy typu NICS). Podobne metody obliczeniowe chemii kwantowej dr hab. Małgorzata Broda zastosowała w badaniach harmonicznym i anharmonicznym częstości drgań małych cząsteczek. Istotną pozycję w jej dorobku stanowią również publikacje z innego obszaru badawczego - dotyczące struktury i własności porfiryn i ftalocyjanin.

Niewątpliwie należy podkreślić bardzo znaczące osiągnięcia dr hab. Małgorzaty Brody w działalności dydaktycznej. W dwóch przewodach doktorskich, zakończonych w 2014 i 2015 r., była promotorem; obecnie jest promotorem dwóch następnych prac oraz opiekunem naukowym kolejnej pracy doktorskiej. Ponadto była promotorem wielu prac magisterskich i licencjackich (w ciągu ostatnich kilku lat, już po habilitacji - sześciu prac magisterskich). Dr hab. M. Broda prowadzi wiele wykładów, konwersatoriów i ćwiczeń, m.in. wykłady ze spektroskopii, chemii kwantowej, modelowania molekularnego i stereochemii; była także recenzentem trzech prac doktorskich oraz kilkunastu prac magisterskich i licencjackich.

Dr hab. Małgorzata Broda od dawna pełni liczne odpowiedzialne funkcje organizacyjne, m.in. od 2011 r. jest kierownikiem Zakładu Chemii Fizycznej i Modelowania Molekularnego Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego. Już drugą kadencję (pierwsza 2012-2016, obecna - 2016-2020) jest prodziekanem ds. nauki Wydziału

Chemii oraz Senatorem Uniwersytetu Opolskiego. Od wielu lat dr hab. M. Broda wchodzi także w skład licznych wydziałowych, senackich i uczelnianych komisji do spraw naukowych.

Podsumowując, uważam, że dr hab. Małgorzata Broda w znacznym stopniu wzbogaciła swój dorobek naukowy po uzyskaniu stopnia doktora habilitowanego. Oceniając jej dorobek naukowy oraz osiągnięcia dydaktyczne i organizacyjne, stwierdzam z przekonaniem, że spełniają one zarówno ustawowe (ustawa z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, z późniejszymi zmianami), jak też zwyczajowe wymagania stawiane kandydatom do tytułu profesora. Wnoszę zatem o dopuszczenie dr hab. Małgorzaty Brody do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania tytułu profesora.

Michał Jaszcuński

