



UNIwersYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII  
Zakład Modelowania Molekularnego



CHEMIA UG

Tel. +48 58 523 5124, fax +48 58 523 5012, email: adam.liwo@ug.edu.pl

Gdańsk, dnia 29.01.2019 r

prof. dr hab. Józef Adam Liwo  
Wydział Chemii Uniwersytetu Gdańskiego  
ul. Wita Stwosza 63  
80-308 Gdańsk

**Ocena dorobku naukowego, osiągnięć w kształceniu kadry oraz aktywności dydaktycznej i organizacyjnej Pani dr hab. Małgorzaty Anny Brody, w związku z postępowaniem Rady Naukowej Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego w sprawie nadania Jej tytułu profesora nauk chemicznych**

Przedmiotem niniejszej oceny są osiągnięcia naukowe, dydaktyczne i organizacyjne Pani dr hab. Małgorzaty Anny Brody, w związku z postępowaniem w sprawie nadania Jej tytułu naukowego profesora nauk chemicznych prowadzonym przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego, zgodnie z art. 26 ust. 4 Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. z 2014 r. poz. 1852 ze zm.). Podstawą opinii są materiały otrzymane przeze mnie od Dziekana Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego, na które składają się (1) ankieta osiągnięć naukowych Kandydatki, zawierająca zestawieniem autorskich i współautorskich publikacji naukowych w czasopismach krajowych i międzynarodowych na poszczególnych etapach Jej kariery naukowej, zestawienie wykładów i innych wystąpień na konferencjach oraz opis najważniejszego osiągnięcia naukowego, (2) autoreferat dotyczący pracy i osiągnięć naukowych oraz działalności dydaktycznej i organizacyjnej Kandydatki (3) elektroniczne kopie odpisów dyplomów doktorskiego i habilitacyjnego.

Pani dr hab. Małgorzata Anna Broda ukończyła studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego na kierunku chemia i uzyskała tytuł zawodowy magistra chemii w roku 1982. Opiekunem jej pracy magisterskiej a później promotorem pracy doktorskiej był prof. dr hab. Jerzy P. Hawranek. W roku 1990, mając w dorobku już 5 publikacji w czasopismach międzynarodowych, obroniła rozprawę doktorską pt. „Relaksacja oksydacyjna w halogenofenolach”, uzyskując stopień doktora nauk chemicznych. W roku 2009 uzyskała stopień doktora habilitowanego nauk chemicznych, na podstawie rozprawy habilitacyjnej pt. "Steroelektronowe właściwości  $\alpha,\beta$ -dehydroaminokwasów". W okresie od 1982 do 1993 roku była zatrudniona (na stanowisku najpierw asystenta-stażysty a po obronie doktoratu adiunkta) na Wydziale Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego, prowadząc badania



naukowe w grupie prof. Hawranka. Począwszy od roku 1993 jest zatrudniona na Wydziale Chemii Uniwersytetu Opolskiego, obecnie na stanowisku profesora nadzwyczajnego.

### **Ocena dorobku naukowego**

W dniu złożenia wniosku o wszczęcie postępowania o nadanie tytułu profesora, Pani dr hab. Małgorzata Broda opublikowała łącznie 69 prac w czasopismach z listy filadelfijskiej, z czego 39 po habilitacji. Sumaryczny współczynnik wpływu prac opublikowanych przez nią wynosi 103,756, z tego 72,388 po habilitacji. Całkowita liczba cytowań jej prac, bez autocytowań, wynosiła na dzień składania wniosku 590 a indeks Hirscha wynosił, w dniu składania wniosku, 14. Wszystkie prace zostały opublikowane w dobrych i bardzo dobrych czasopismach (J. Phys. Chem. B, Chem. Phys. Lett., J. Mol. Struct., itp.). Kandydatka wygłosiła 2 wykłady na zaproszenie na konferencjach międzynarodowych, co dowodzi jej rozpoznawalności w środowisku naukowym, ponadto przedstawiła łącznie 86 prezentacji konferencyjnych (65 po habilitacji).

Pani dr hab. Małgorzata Broda rozpoczęła swoją działalność naukową w toku studiów magisterskich, pod kierunkiem prof. Hawranka. Do czasu przeniesienia się na Uniwersytet Opolski, tematyka Jej badań koncentrowała się głównie na wpływie rozpuszczalnika na widma oscylacyjne układów z wewnątrzcząsteczkowym wiązaniem wodorowym, głównie podstawionych fenoli; zjawisko to jest znane jako relaksacja oscylacyjna. Na podstawie numerycznej analizy pasm IR Kandydatka wykazała m.in., że główną składową są oddziaływania dyspersyjne, których wielkość nie zależy zbyt od rozpuszczalnika natomiast zależy od rozpuszczalnika składowa elektrostatyczna (oddziaływania dipol-dipol). W relacjonowanym tutaj okresie działalności naukowej, p. dr hab. Małgorzata Broda odbyła dwa krótkoterminowe staże naukowe, odpowiednio na Uniwersytecie w Utrechcie (Holandia), pod kierunkiem prof. J.H. van der Maasa oraz w Institut für Theoretische Chemie, Karl-Franzens Universität Graz (Austria), w grupie prof. R. Janoschka, w czasie których miała okazję poznać inną tematykę badawczą. W okresie stażu w Holandii wykonywała pomiary w podczerwieni metodą ATR mutarotacji D-glukozy a w okresie stażu w Austrii badała metodami modelowania molekularnego właściwości konformacyjne fruktozy oraz wpływ przyjmowanej konformacji na położenie pasm w widmie IR.

Po przeniesieniu się na Uniwersytet Opolski, nastąpiła zmiana tematyki naukowej uprawianej przez Kandydatkę na tę będącą przedmiotem zainteresowania kierowanej przez prof. Barbarę Rzeszotarską Katedry Chemii Organicznej, z którą Kandydatka związała swoją dalszą działalność. Tematyka ta obejmowała właściwości konformacyjne  $\alpha,\beta$ -dehydroaminokwasów oraz zbudowanych z nich peptydomimetyków, które są ważnymi analogami bioaktywnych peptydów. Kandydatka używała do tych badań metod chemii kwantowej oraz metod eksperymentalnych, głównie spektroskopii w podczerwieni. Kandydatka wykazała, że dla tak modyfikowanych aminokwasów globalnym minimum energii staje się nietypowa analogami naturalnych aminokwasów, stosowanymi w syntezie analogów dla naturalnych aminokwasów konformacja H/F ( $\phi,\psi = -40^\circ, 130^\circ$ ). Wykazała istnienie sprzężenia pomiędzy układem  $\pi$ -elektronowym grupy  $\alpha,\beta$ -dehydro a wiązaniem



amidowym, które zmniejsza sprzężenie w grupie amidowej. Udowodniła też, że wprowadzenie reszty dehydro nie zawsze wiąże się ze zmniejszeniem swobody konformacyjnej łańcucha głównego. Wykazała też ścisły związek pomiędzy właściwościami konformacyjnymi badanych związków a ich tendencją do asocjacji. Dorobek naukowy będący wynikiem tych badań stał się podstawą habilitacji Kandydatki. W tym okresie Kandydatka prowadziła też inne badania dotyczące oddziaływań stabilizujących strukturę peptydów oraz innych związków organicznych.

Po uzyskaniu stopnia doktora habilitowanego, Kandydatka kontynuowała i dalej rozwinęła tematykę badań konformacji peptydów zawierających reszty  $\alpha,\beta$ -dehydroaminokwasowe, rozszerzając ją na peptydy zawierające aminokwasy N-metylowane. Z uwagi na większą niż naturalne peptydy odporność na degradację enzymatyczną tak modyfikowane peptydy są przedmiotem zainteresowania chemii medycznej. Ponadto Kandydatka włączyła do badań analogi peptydów, w których grupę peptydową zastąpiono pierścieniem oksazolanowym, oksazolinowym lub tiazolowym. Wspólnie z kierowanym przez siebie zespołem Kandydatka wykonała benedyktyńską pracę, której wynikiem było obliczenie metodami chemii kwantowej map energii potencjalnej blokowanych modyfikowanych aminokwasów oraz dipeptydów. Oprócz metod chemii kwantowej, w badaniach tych były stosowane metody eksperymentalne: IR, NMR EPR i dyfraktometryczne. Całokształt tych prac oraz wnioski wyciągnięte z obliczeń stanowi najważniejsze osiągnięcie naukowe Kandydatki po habilitacji, na które składa się 19 publikacji w czasopiśmie międzynarodowych. Najważniejszymi wnioskami wyciągniętymi przez Kandydatkę z prac składających się na osiągnięcie naukowe są (i) stwierdzenie większej siły wiązań wodorowych tworzonych przez grupę -NH reszt  $\alpha,\beta$ -dehydroaminokwasowych niż w przypadku naturalnych reszt aminokwasowych, co jest wynikiem zarówno zmian preferencji konformacyjnych jak i większej polaryzacji grupy -NH, (ii) stwierdzenie dużej roli rozpuszczalnika w stabilizacji typowych struktur drugorzędowych utworzonych przez N-metylowane peptydy, (iii) stwierdzenie znacznie większej redukcji płynności modelowej błony liposomowej domieszkowanej peptydami zawierającymi drugo- i trzeciorzędowe wiązanie amidowe od strony C-końca peptydu oraz (iv) stwierdzenie zmiany własności konformacyjnych peptydów, w których wiązanie amidowe zastąpiono heterocyklem.

Oprócz badań nad peptydomimetykami, Kandydatka w okresie po habilitacji prowadziła, na przykładzie prostych związków organicznych, badania nad zastosowaniem modelu oscylatora anharmonicznego i doбором właściwego funkcjonału gęstości w metodzie DFT do obliczania częstości drgań w widmie IR. Te badania zaowocowały współpracą międzynarodową z prof. Anne-Marie Kettler z Instytutu Chemii Fizycznej i Teoretycznej Uniwersytetu w Graz (Austria), której efektem były 2 wspólne projekty z austriackiej agencji grantowej; jeden z nich był kierowany przez Kandydatkę. We współpracy z dr hab. Rudolfem Słotą prowadziła też badania nad porfirynami i ftalocyjaninami w kontekście ich właściwości fotosensybilizujących oraz ich oddziaływaniami z peptydami.



Za swoją działalność naukową p. dr hab. Małgorzata Broda otrzymała trzykrotnie Indywidualną Nagrodę Naukową II stopnia Rektora UO. W roku 2017 otrzymała również Medal za Długoletnią Służbę nadawany przez Prezydenta RP.

Podsumowując tę część oceny stwierdzam, że dorobek naukowy Pani dr hab. Małgorzaty Brody stanowi bardzo istotny wkład do naszej wiedzy o właściwościach konformacyjnych peptydomimetyków i ich fizykochemii a z uwagi na duże znaczenie tych związków w chemii medycznej ma przeniesienie na zastosowania praktyczne. Należy również podkreślić, że Kandydatka w swoich badaniach znakomicie łączy metody teoretyczne z doświadczalnymi. W mojej opinii, pod względem dorobku naukowego, Pani dr hab. Małgorzata Broda zdecydowanie spełnia wymagania stawiane kandydatom do tytułu profesora nauk chemicznych.

### **Działalność dydaktyczna oraz kształcenie młodej kadry naukowej**

Pani dr hab. Małgorzata Broda jest dydaktykiem o bardzo bogatym dorobku. W czasie pracy na Wydziale Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego prowadziła ćwiczenia laboratoryjne z chemii fizycznej, laboratorium z informatyki oraz ćwiczenia laboratoryjne nt. zastosowania metod spektroskopowych. Po przeniesieniu się na Uniwersytet Opolski prowadziła przedmiot "Stereochemia" (wykład i konwersatorium), "Chemia organiczna podstawowa" (laboratorium), "Chemia organiczna I" (wykład i konwersatorium) "Chemia teoretyczna" (wykład, konwersatorium i ćwiczenia laboratoryjne) i "Modelowanie molekularne". Obecnie prowadzi 13 przedmiotów kursowych i fakultatywnych dla kierunków Chemia i Bioinformatyka oraz seminarium interdyscyplinarne dla studium doktoranckiego. Była promotorem 2 zakończonych publiczną obroną rozpraw doktorskich. Obecnie pełni funkcję promotora w dwóch otwartych przewodach doktorskich i sprawuje opiekę nad jeszcze jednym doktorantem. Była promotorem 11 prac magisterskich a sprawowała ponadto opiekę merytoryczną nad 16 innymi magistrantami. Była również opiekunką Koła Naukowego Chemików "Koronan". Pod względem działalności dydaktycznej oraz mentorskiej Kandydatka zdecydowanie spełnia zatem wymogi stawiane kandydatom do tytułu profesora.

### **Działalność organizacyjna**

Pani dr. hab. Małgorzata Broda pełniła w latach 2012-2016 i obecnie przez drugą kadencję pełni funkcję Prodziekana ds. Nauki Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego. Począwszy od roku 2011 jest jednym z senatorów tej uczelni. W obecnej kadencji władz uczelni jest elektorem uczelnianego kolegium elektorów. Od dnia 1.11.2011 roku pełni funkcję Kierownika Zakładu Chemii Fizycznej i Modelowania Molekularnego Wydziału Chemii UO. Od 14 maja 2015 roku jest członkiem Rady Naukowej Studiów Doktoranckich. Była i jest członkiem 8 komisji i zespołów związanych z działalnością macierzystego Wydziału i Uczelni. W latach 2017-2018 była członkiem Komisji do opiniowania wniosków o stypendia doktoranckie Marszałka Województwa Opolskiego, w roku 2012 członkiem zespołu eksperckiego powołanego przez Uniwersytecką Komisję Akredytacyjną; obecnie jest członkiem zespołu oceniającego kierunek chemia powołanego przez tę Komisję. Jest również członkiem Stypendialnej Komisji Doktoranckiej na Wydziale Chemii. Ponadto uczestniczyła



w charakterze sekretarza w trzech komisjach habilitacyjnych. Była również członkiem komitetów organizacyjnych czterech konferencji międzynarodowych. Pod względem działalności organizacyjnej p. dr Małgorzata Broda spełnia z nawiązką wymagania stawiane kandydatom do tytułu profesora.

### **Współpraca krajowa i międzynarodowa oraz współpraca z otoczeniem gospodarczym**

Jak wspominałem wcześniej, Kandydatka nawiązała skuteczną, trwającą po dziś dzień współpracę z prof. Anne-Marie Kelterer z Uniwersytetu Technicznego w Graz (Austria). Ponadto współpracuje z grupą prof. Hong-Ming Lin z Uniwersytetu Tatung w Taipei (Tajwan) oraz z dr Jakubem Kaminskym z Instytutu Chemii i Biochemii Akademii Nauk Republiki Czeskiej. Współpracuje również z wieloma naukowcami krajowymi. Współpracuje z Przedsiębiorstwem Produkcyjno-Handlowym KOSMED z siedzibą w Głubczycach oraz wykonała jedną ekspertyzę i opracowała jedną innowację produktową dla przemysłu.

### **Inne osiągnięcia**

Pani dr hab. Małgorzata Broda była recenzentem w trzech przewodach doktorskich oraz recenzentem 14 prac magisterskich i licencjackich. Wykonywała i wykonuje recenzje artykułów dla 6 międzynarodowych czasopism naukowych (J. Mol. Modeling, J. Mol. Struct., J. Phys Chem., Spectrochim. Acta, Struct.Chem., Vibr. Spectr.). Posiada również znaczące osiągnięcia w popularyzacji nauki. Opublikowała 3 artykuły i wygłosiła w wykłady popularnonaukowe. W latach 2007-2017 przygotowała i poprowadziła wykłady z chemii dla uczniów szkół podstawowych i ponadpodstawowych, w ramach Festiwalu Nauki.

### **Podsumowanie i wniosek końcowy**

Na podstawie przeprowadzonej powyżej analizy stwierdzam, że dorobek naukowy, dydaktyczny oraz organizacyjny Pani dr hab. Małgorzaty Anny spełnia wymogi art. 26 ust. 4 Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. z 2014 r. poz. 1852 ze zm.) stawiane kandydatom do tytułu naukowego profesora. Kandydatka wniosła bardzo istotny wkład do poznania konformacji i właściwości fizykochemicznych peptydomimetyków, znakomicie łącząc w swoich badaniach metody teoretyczne i eksperymentalne. Współpracuje z wieloma ośrodkami naukowymi, czego dowodem są wspólne publikacje w międzynarodowych czasopismach naukowych. Pod jej kierunkiem zakończyły się obroną dwa przewody doktorskie dwa kolejne są w toku. Udowodniła zatem, że jest mentorem młodej kadry naukowej. W swoim dorobku ma wykłady na zaproszenie oraz regularnie recenzuje artykuły dla czasopism naukowych dowodząc tym samym, że jest rozpoznawalna w środowisku i jej opinia się liczy. Aktywnie angażuje się w popularyzację nauki. Dlatego z pełnym przekonaniem wnoszę do Wysokiej Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego o dopuszczenie Pani dr hab. Małgorzaty Anny Brody do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania Jej tytułu profesora nauk chemicznych.

KIEROWNIK  
Pracowni Modelowania Molekularnego  
*prof. dr hab. Hong-Ming Lin*