



Warszawa, 20.01.2019 r.

Prof. dr hab. Aleksandra Misicka-Kęsik
Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego
ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa
mail: misicka@chem.uw.edu.pl

**Ocena
dorobku naukowego i osiągnięć dydaktyczno-wychowawczych
dr hab. Małgorzaty Brody, profesora Uniwersytetu Opolskiego,
w związku z postępowaniem kwalifikacyjnym o nadanie jej
tytułu naukowego profesora**

Przedstawiony przez dr hab. Małgorzatę Brodę wykaz osiągnięć w pracy naukowo-badawczej, dydaktyczno-wychowawczej i organizacyjnej, opis prowadzonych przez nią badań naukowych dają wystarczającą podstawę do pozytywnej oceny kwalifikacji autorki w związku z postępowaniem o nadanie jej tytułu naukowego profesora. Poniżej przeprowadzę oddzielnie szczegółową ocenę dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego kandydatki.

Dorobek naukowy

Dr hab. Broda jest współautorką 69 publikacji, z tego 39 zostało opublikowanych po habilitacji, wszystkie te prace ukazały się w renomowanych czasopismach międzynarodowych, o łącznym IF=103,8. Publikacje te były (wg. Web of Science) 414 razy cytowane (z wyłączeniem autocytowań), ale z oglądu cytowań rocznych wynika wyraźnie, że w ostatnich 5 latach ilość cytowań jej prac znacząco wzrosła i wynosi średnio około 50 cytowań rocznie.

Indeks Hirscha jej prac wynosi 14. Wszystkie 39 prac po habilitacji są pracami wieloautorskimi, ale z tego niemal w połowie prac (16) dr hab. Broda jest autorem korespondującym (ostatnim lub pierwszym autorem). Dlatego też jej wiodąca rola w tym cyklu prac nie ulega dla mnie wątpliwości.

Okres doktorancki

Małgorzata Broda uzyskała stopień magistra na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego w 1982 r. Praca magisterska pt. „Kształt pasma $\nu_s(OH)$ w układach z wewnętrzną cząsteczkowym wiązaniem wodorowym” była wykonana pod kierunkiem profesora Jerzego Hawranka.

Po zrobieniu magisterium została mgr Broda zatrudniona na stanowisku asystenta stażysty w Instytucie Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego w zespole profesora Hawranka, który był promotorem jej pracy doktorskiej. Rozprawa doktorska pt. „Relaksacja oscylacyjna w halogenofenolach” została obroniona na UW w 1990 r.

Okres podoktorski

Po doktoracie dr Broda odbyła dwa krótkie staże zagraniczne – 3-miesięczny w zespole prof. van der Massa'a na Uniwersytecie w Utrechcie i 1-miesięczny w zespole prof. Janoschek'a na Uniwersytecie w Graz. Oba staże dotyczyły nowych dla dr Brody zagadnień związanych z mutarotacją i badaniami konformacyjnymi węglowodanów (glukozy i fruktozy).

Po pierwszym okresie pracy na Uniwersytecie Wrocławskim w zespole profesora Hawranka dr Broda w 1993 r. podjęła pracę w Instytucie Chemii Uniwersytetu Opolskiego w zespole kierowanym przez profesor Barbarę Rzeszotarską, włączając się z wielkim sukcesem w prowadzoną w tym zespole tematykę związaną z syntezą i badaniem konformacji α,β -dehydropeptydów. Oprócz badań w zakresie konformacji α,β -dehydropeptydów dr Broda prowadziła też w tym okresie badania dotyczące oddziaływań stabilizujących struktury peptydów, optymalizacji geometrii dla tautomerycznych form aminokwasów pirazolowych, jak również badań właściwości nitroamin i aminoazoksybenzenu (te ostatnie były wykonane we współpracy z zespołem dr. hab. Janusza Kyzioła).

Podstawę jej pracy habilitacyjnej stanowiły 24 publikacje dotyczące badań konformacyjnych α,β -dehydropeptydów, głównie przy zastosowaniu obliczeń kwantowo-chemicznych i spektroskopii w podczerwieni, ale również z wykorzystaniem metod *ab initio* i DFT. Na podstawie rozprawy habilitacyjnej pt. „*Stereoelektronowe właściwości pochodnych α,β -dehydroaminokwasów*” i kolokwium habilitacyjnego Rada Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego nadała jej w 2009 r. stopień doktora habilitowanego w zakresie chemii, specjalności chemia fizyczna i teoretyczna.

Ocena dorobku naukowego w okresie po habilitacji

Interesujące wyniki prac dr Brody z okresu przedhabilitacyjnego były wykorzystywane przez wielu badaczy w planowaniu nowych analogów peptydów biologicznie czynnych. Dlatego też naturalne było podjęcie przez nią wspólnych badań z dr hab. Dawidem Siodłakiem w zakresie badań dotyczących właściwości izomerów Z i E pochodnych dehydrofenyloalaniny, jak również innych dehydropeptydów. Dr hab. Małgorzata Broda wykorzystywała w swoich badaniach różne metody chemii kwantowej (DFT, MP2), a wyniki konfrontowała z danymi doświadczalnymi (struktury krystalograficzne, widma IR i NMR). Z tych zagadnień ukazało się 14 publikacji.

Dr hab. Broda podjęła również wspólnie z dr hab. Siodłakiem badania dotyczące modelowych badań peptydów zawierających heterocykliczne pierścienie oksazolowe, oksazolinowe, tiazolowe lub pirazolowe, ponieważ takie układy występują wśród peptydów wyizolowanych z metabolitów mikroorganizmów morskich. Jest to również tematyka jej obecnej doktorantki, mgr Moniki Staś.

W tym okresie dr hab. Broda zainicjowała także badania w zakresie innych modyfikacji strukturalnych peptydów mających na celu zwiększenie stabilności proteolitycznej peptydów i ich zdolności przechodzenia przez błony komórkowe. Wspólnie ze swoją doktorantką podjęła badania preferencji konformacyjnych w zakresie N-metylo-peptydów i ich wpływu na właściwości strukturalne i dynamiczne błon lipidowych. Z tych zagadnień ukazały się 3 publikacje.

Niezależnie od głównego wątku badań związanych z określaniem właściwości konformacyjnych niestandardowych reszt aminokwasów i ich wpływu na strukturę drugorzędową modelowych peptydów (21 publikacji) dr hab. Broda prowadziła wspólne badania w zakresie próby rozwiązania problemu wiarygodnego modelowania właściwości spektroskopowych związków organicznych (z dr. hab. Kupką, jak również z prof. Kelterer z Uniwersytetu w Graz, w Austrii). Badania te są prowadzone w ramach wspólnego projektu, który uzyskał finansowanie austriackiej agencji rządowej OeAD-GmbH (Austrian Agency for International Cooperation in Education and Research) w latach 2016-18 i 2018-20.

Dr hab. Broda jest jednocześnie bardzo aktywna na polu badań właściwości fizykochemicznych, strukturalnych i katalitycznych nowych *meso*-podstawionych pochodnych porfiryn. Prowadzone przez nią

badania w zakresie fotouczulaczy mogących znaleźć zastosowanie w fotodynamicznej terapii przeciwnowotworowej (PDT) są tematem pracy doktorskiej mgr Kliber-Jasik jej obecnej doktorantki.

Reasumując w okresie po habilitacji dr hab. Małgorzata Broda opublikowała w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym 39 prac. Łączny impakt faktor (IF) tych prac wynosi 72,4. Prace te opublikowane zostały w anglojęzycznych międzynarodowych czasopiśmie naukowych. Wśród czasopism można wymienić m.in. *J Mol Model*, *J Mol Struct*, *J Raman Spectrosc*, *Struct Chem*, *Spectrochimica Acta A*, *J Phys Chem B*, *Chem Phys Lett*, *Biopolymers*, *J Pept Sci*, *Molecules*, *J Biol Inorg Chem*, *Chem Biodivers*.

Dr hab. Broda uczestniczy aktywnie w krajowych i zagranicznych konferencjach naukowych (załączony wykaz obejmuje 65 konferencji po uzyskaniu habilitacji). A za swoje badania naukowe była nagradzana przez Rektora Uniwersytetu Opolskiego (w 2009, 2011 i 2014 r.)

Niestety bardzo skromnie prezentuje się udział dr hab. Brody w zdobywaniu i realizacji grantów. Na jej plus należy zaliczyć podjęcie współpracy z profesorem Kelterer z Uniwersytetu w Graz, która zaowocowała uzyskaniem grantów na polsko-austriackie projekty badawcze finansowane przez Austrian Agency for International Cooperation in Education and Research) w latach 2016-18 i 2018-20.

Wydaje się, że inne współpracy naukowe podjęte po habilitacji przez dr hab. Brodę, np. z prof. Lin z Tatung University na Tajwanie, dr Kamynskym z Institute of Organic Chemistry and Biochemistry w Czechach i prof. Sauer'em z Univeristy of Copenhagen w Danii w zakresie modelowania molekularnego anharmoniczności drgań małych modelowych cząsteczek stworzą nowe możliwości grantowe.

Z powyższego zestawienia widać wyraźnie, że aktywność naukowa dr hab. Brody jest znacząca. Zarówno ilość publikacji i impakt faktory czasopism, w których publikuje świadczą, że jest ona badaczem aktywnym w szczególności na polu badań strukturalnych peptydów zawierających niestandardowe reszty aminokwasowe.

Dorobek dydaktyczny

Dr hab. Broda jest obecnie zatrudniona na stanowisku profesora Uniwersytetu Opolskiego, co oczywiście jest związane z prowadzeniem licznych zajęć dydaktycznych zarówno wykładów, jak i ćwiczeń audytoryjnych. Lista prowadzonych wykładów jest niezwykle szeroka i obejmuje: podstawy chemii kwantowej i teoretycznej, spektroskopię, chemię teoretyczną stereochemię, chemię organiczną, modelowanie molekularne, chemię kwantową cząsteczek i makrocząsteczek, chemię fizyczną i informatykę (wykłady dla studentów), jak również spektroskopię molekularną i zastosowanie metod chemii kwantowej (wykłady dla doktorantów). Z podanego spisu prowadzonych zajęć wydać wyraźnie, że dr hab. Broda jest prowadzi bardzo różnorodny wykłady, co świadczy o jej wielkim zaangażowaniu w proces dydaktyczny zarówno w ramach studiów magisterskich, jak i doktorskich.

Dr hab. Broda była do tej pory promotorem 2 prac doktorskich (dr Buczek i dr Wałęsy), obecnie jest promotorem następnych dwóch doktorantek (mgr Staś i mgr Kliber-Jasik), jak również sprawuje opiekę naukową nad mgr Kołodziejem, który nie ma jeszcze otwartego przewodu doktorskiego.

Obie prace doktorskie wykonane pod kierunkiem dr hab. Brody zostały wyróżnione przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego. Dodatkowo doktorantka mgr Aneta Buczek za osiągnięcia naukowe podczas wykonywania pracy doktorskiej otrzymała stypendium MNiSW (2012/13) oraz nagrodę JM Rektora Politechniki Wrocławskiej (2013/14), a jej rozprawa doktorska została nagrodzona w 2015 r w konkursie na pracę doktorską zrealizowaną w oparciu o zasoby obliczeniowe ACK CYFRONET.

Zgodnie z wymaganiami na tytuł profesora dr hab. Broda ma w dorobku wykonanie 3 recenzje prac doktorskich (dr Karola Jędrzejczaka z Politechniki Łódzkiej, oraz dr Tomasa Czaji i dr Martyny Horochowskiej z Uniwersytetu Wrocławskiego. Również wykonała szereg recenzji dla renomowanych czasopism naukowych.

Dr hab. Broda ma na swoim koncie również kilka publikacji o charakterze popularnonaukowym, jak

również udział w imprezach popularyzujących naukę w ramach Festiwalu Nauki, Uniwersytetu Trzeciego Wieku w Kluczborku. Była też w latach 2008-2010 opiekunem Koła Naukowego Chemików „Korona”.

Dorobek organizacyjny

Dr hab. Małgorzata Broda jest bardzo aktywna na polu organizacyjnym zarówno na Wydziale Chemii, jak również w ramach całego Uniwersytetu Opolskiego. Od 6 lat pełni funkcję prodziekana ds. nauki Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego (kadencje: 2012-16 i 2016-20), jest również członkiem Senatu i wielu komisji senackich UO (m in. komisji ds. Badań i Współpracy z Zagranicą, uczelnianego Zespołu ds. parametryzacji), jest również członkiem Rady Naukowej Studiów Doktoranckich na Wydziale Chemii, komisji rekrutacyjnej na studia doktoranckie i komisji ds. oceny jakości kształcenia.

Dr hab. Broda od 2011 r. jest Kierownikiem Zakładu Chemii Fizycznej i Modelowania Molekularnego Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego.

Uczestniczyła w charakterze sekretarza w 3 komisjach do spraw nadania stopnia doktora habilitowanego prowadzonych na Wydziale Chemii Uniwersytetu Opolskiego.

Do działalności organizacyjnych należy też zaliczyć aktywność w komitetach naukowych i organizacyjnych trzech Polsko-Taiwańskich konferencji: *“From Molecular Modeling to Nano- and Biotechnology”*, Opole, 2–6. 09.2014, Opole, 2–6. 06.2015, Taipei, 27–29. 06.2016 i 3rd *Symposium on Weak Intermolecular Interactions*, Opole, 27-29.03.2017.

PODSUMOWANIE

Większość dorobku naukowo-badawczego dr hab. Brody związana jest z analizą konformacyjną niestandardowych reszt aminokwasowych, wykonywaną metodami kwantowo-chemicznymi, ale również z wykorzystaniem metod *ab initio* i DFT. Otrzymane wyniki były konfrontowane z danymi doświadczalnymi (struktury krystalograficzne, widma IR i NMR). Wyniki jej prac pozwalają ocenić wpływ przebadanych aminokwasów na strukturę drugorzędową modelowych peptydów. Są to niezwykle interesujące dane dla innych badaczy, w tym syntetyków, którzy modyfikują wyjściowe peptydy w celu uzyskania związków o lepszych własnościach farmakokinetycznych. Wyniki badań dr hab. Brody wskazały na wiele bardzo istotnych zmian konformacyjnych modyfikowanych peptydów na skutek np. obecnych wiązań wodorowych lub oddziaływań z rozpuszczalnikiem. A wiedza na temat jak poszczególne wprowadzane zmiany wpływają na konformację łańcucha głównego i łańcuchów bocznych, jest w badaniach zależności aktywności biologicznej od struktury chemicznej niezwykle istotna.

Dr hab. Broda oprócz intensywnej działalności naukowo-badawczej, jest bardzo aktywna zarówno na polu aktywności naukowo-dydaktycznej, jak i organizacyjnej.

WNIOSEK

Podsumowując stwierdzam, że dr hab. Małgorzata Anna Broda spełnia bez zastrzeżeń zwyczajowe i ustawowe (art. 26 ustawy) wymagania stawiane kandydatom do tytułu profesora i jest to kandydatura wsparta ciekawym i oryginalnym dorobkiem naukowym z jednej strony i bardzo znaczącym dorobkiem organizacyjnym i dydaktycznym z drugiej.

A. Błaszczyk