



Politechnika Wroclawska

Wydział Chemiczny W3/K1, Wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

Wrocław, 7 stycznia 2019 r.

Prof. dr hab. inż. W. Andrzej Sokalski
Katedra Inżynierii i Modelowania Materiałów Zaawansowanych
Politechnika Wroclawska
Wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

Ocena dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego w związku z prowadzonym postępowaniem w sprawie nadania dr hab. Małgorzacie Annie Brodzie tytułu profesora w dziedzinie nauk chemicznych

Niniejszą opinię sporządziłem na prośbę Rady Naukowej Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego, w związku z prowadzonym przez nią postępowaniem o nadanie tytułu profesora dr hab. Małgorzacie Annie Brodzie. Opinia została opracowana w oparciu o dokumentację przygotowaną przez Kandydatkę, na którą składają się: Autoreferat z opisem działalności naukowej, osiągnięć w zakresie opieki naukowej i kształcenia młodej kadry, działalności popularyzującej naukę i organizacyjnej, ankiety oceny osiągnięć naukowych m.in. z informacją o współpracy z otoczeniem społecznym i gospodarczym oraz o współpracy międzynarodowej.

Dr hab. Małgorzata Anna Broda zatrudniona w charakterze profesora nadzwyczajnego na Wydziale Chemii Uniwersytetu Opolskiego prowadzi badania z zakresu chemii fizycznej specjalizując się w zakresie spektroskopii molekularnej.

Pierwszy etap kariery naukowej dr hab. Małgorzaty Brody związany był z Wydziałem Chemii Uniwersytetu Wroclawskiego, gdzie pracując pod

kierunkiem prof. J. Piotra Hawranka badała mechanizmy relaksacji oscylacyjnej w układach ze słabymi wiązaniami wodorowymi, broniąc w 1990 roku rozprawę doktorską pt. „Relaksacja oscylacyjna w halogenofenolach”.

Po doktoracie dr Broda odbyła staże podoktorskie w grupie prof. van der Maasa na Uniwersytecie w Utrechcie, badając zmiany w wiązaniami wodorowych w procesie mutarotacji D-glukozy oraz w zespole prof. Janoschka w Uniwersytecie w Graz, zajmując się wpływem konformacji fruktozy na położenie pasm w widmie podczerwonym.

W roku 1993 dr Broda została zatrudniona w Instytucie Chemii Uniwersytetu Opolskiego, gdzie w zespole prof. Rzeszotarskiej i włączyła się w badania nad właściwościami konformacyjnymi alfa, beta-dehydropeptydów. W tym okresie analizowała szczegółowe preferencje konformacyjne w modelowych układach diamidowych oraz dla dwupeptydów, stosując oprócz technik doświadczalnych metody kwantowo-chemiczne, wykazując m.in. istnienie związku między właściwościami konformacyjnymi i zdolnością do samoasocjacji. W oparciu o w/w wyniki dr Broda w 2008 r. uzyskała stopień doktora habilitowanego na podstawie rozprawy pt. „Steroelektronowe właściwości alfa, beta-dehydroaminokwasów”.

Całkowity dorobek naukowy dr hab. Małgorzaty Brody obejmuje 69 publikacji (w tym 39 po habilitacji) w czasopismach z listy filadelfijskiej. Część ze wspomnianych prac została opublikowana w renomowanych czasopismach międzynarodowych takich jak: Journal of Physical Chemistry B, Biopolymers, Journal of Raman Spectroscopy, Spectrochimica Acta A, Molecules, Journal of Biological Inorganic Chemistry oraz Dyes & Pigments.

Aktualna liczba cytowań wszystkich 69 publikacji dr hab. Brody (bez autocytowań współautorów) wynosi obecnie ponad 514 (wg bazy Scopus) lub 420 (według bazy Web of Science), co może świadczyć o wartości tych prac i rozpoznawalnej pozycji Autorki w międzynarodowej społeczności naukowej.

39 prac opublikowanych po habilitacji było cytowanych ponad 242 razy przez innych autorów.

Po habilitacji dr hab. Broda kontynuowała wcześniejsze kierunki badań rozszerzając je m.in. o analizę właściwości izomerów E oraz Z reszty alfa,beta-dehydrofenyloalaniny włączonej w łańcuch peptydowy, co pozwoliło odkryć nietypową konformację H. Systematyczne badania preferencji konformacyjnych peptydów pod wpływem N-metylowania wiązania amidowego względnie wbudowania zamiast wiązania peptydowego grupy estrowej, pierścieni oksazolowych, oksazolinowych lub pirazolowych stanowią najbardziej wartościowy wkład Kandydatki w literaturę przedmiotu.

Do najważniejszych oryginalnych osiągnięć dr hab. Brody należy zaliczyć ustalenie, że wiązania wodorowe peptydów zawierających alfa,beta-dehydroaminokwasy są silniejsze od normalnych peptydów, co częściowo wynika z oddziaływania podwójnego wiązania C=C z grupą N-H. Ważnym wynikiem badań dr hab. Brody było wyjaśnienie wpływu N-metylowania peptydów na wzrost energii oddziaływań z lecytyną.

Wartościowym wynikiem prac zespołu dr hab. Brody we współpracy z dr hab. Teobaldem Kupką było określenie wpływu przybliżenia anharmonicznego, efektu rozszerzenia bazy funkcyjnej oraz wyboru funkcjonałów gęstości elektronowej na dokładność obliczeń charakterystyk spektroskopowych i magnetycznych modelowych układów molekularnych. W wyniku tego podjęto owocną współpracę z zespołem prof. Kelter z Graz University of Technology, finansowaną aktualnie przez Austrian Agency for International Cooperation in Education and Research.

Odrębnym przedmiotem badań Kandydatki, podjętym we współpracy z zespołem dr hab. inż. Rudolfa Słoty, były fotokatalityczne właściwości nowych pochodnych porfiryny oraz analiza wpływu oddziaływań aminokwasów na fotostabilność ftalocyjanin. Uzyskane wyniki w tym zakresie spotkały się z

dużym zainteresowaniem innych badaczy, o czym mogą świadczyć 52 cytowania trzech prac poświęconych w/w zagadnieniom.

Godną uznania jest ewolucja aktywności badawczej dr hab. Brody, która systematycznie poszerzała swój warsztat badawczy oraz obiekty badań, zmierzając konsekwentnie do wyjaśnienia złożonych zjawisk biofizycznych związanych m.in. z funkcjonowaniem błon liposomowych oraz fotostabilności uczulaczy stosowanych w terapii fotodynamicznej. Dzięki temu możliwe było wykonanie kompleksowych doświadczalnych i teoretycznych badań, z których część może mieć praktyczne zastosowanie. Jak dotąd łączenie działalności teoretycznej z eksperymentalną ciągle jest rzadkością i dlatego zasługuje na szczególne uznanie.

Wyniki badań dr hab. Brody były prezentowane ponad 86 razy (w tym 65 razy po habilitacji) na konferencjach międzynarodowych oraz w zagranicznych ośrodkach naukowych, w tym 2 razy w charakterze zaproszonego wykładowcy w Republice Czeskiej i na Tajwanie.

Dr hab. Broda prowadzi współpracę naukową z zespołem prof. Hong-Ming Lin z Tatung University w Tajwanie, z zespołem prof. Anne-Marie Kelterer z Graz University of Technology w Austrii, dr Jakubem Kaminskim z Institute of Organic Chemistry and Biochemistry w Pradze Czeskiej oraz prof. Stefanem Sauerem z University of Copenhagen w Danii.

Na podstawie analizy dorobku Pani dr hab. Magdaleny Brody można stwierdzić, że uzyskane przez nią oryginalne wyniki naukowe mają znaczenie poznawcze, wnosząc istotny wkład do nauki światowej, szczególnie w zakresie szczegółowego poznania właściwości konformacyjnych modyfikowanych peptydów.

Dorobek dr hab. Brody w zakresie kształcenia młodej kadry jest też znaczący. Pod jej kierunkiem ukończone zostały 2 przewody doktorskie dr Anety Buczek oraz dr Roksany Wałęsy. Wszystkie obrony zakończyły się wyróżnieniem, co może świadczyć o wysokim poziomie opieki naukowej

świadczoną przez Kandydatkę do tytułu profesora. Aktualnie dr hab. Broda jest promotorem w 2 otwartych przewodach doktorskich mgr Moniki Staś, mgr Marty Kliber-Jasik oraz opiekunem naukowym mgr Łukasza Kołodzieja. Niezależnie, dr hab. Broda kierowała realizacją 27 prac magisterskich.

Ponadto dr hab. Broda była recenzentem 3 rozpraw doktorskich, 14 prac magisterskich i recenzowała prace zgłoszone do druku w renomowanych międzynarodowych czasopismach, takich jak m.in. Journal of Physical Chemistry, Spectrochimica Acta, Structural Chemistry, Journal of Molecular Structure oraz Journal of Molecular Modeling.

W zakresie działalności dydaktycznej dr hab. Broda prowadziła na studiach doktoranckich wykłady Spektroskopia molekularna, Podstawy chemii kwantowej i teoretycznej oraz seminarium interdyscyplinarne. Z kolei na studiach magisterskich prowadziła m.in. wykłady Spektroskopia, Chemia teoretyczna, Stereochemia, Chemia organiczna, Modelowanie molekularne, Chemia kwantowa cząsteczek i makrocząsteczek oraz laboratoria z chemii fizycznej i informatyki.

Reasumując, opisany powyżej dorobek dydaktyczny dr hab. Magdaleny Brody można uznać za znaczący.

Była koordynatorem oraz wykonawcą polsko-austriackich projektów "Can the anharmonic model describe the properties of the methanol – benzene binary system ?" oraz „Molecular modeling and spectroscopic studies of inclusion complexes of 5-fluorouracil and 5-fluorocytosine with beta-cyclodextrin”.

Ponadto dr hab. Magdalena Broda współpracowała z Przedsiębiorstwem Produkcyjno-Handlowym KOSMED w zakresie opracowania i wprowadzania na rynek innowacyjnych produktów na bazie surowców pochodzenia naturalnego oraz z firmą Maxiplast Sp. z o.o.


dotyczącą innowacji produktowej. Wykonywała też ekspertyzy dla firmy Silspek Rubber Sp.z o.o. >

Dr hab. Broda aktywnie uczestniczyła w organizacji 4 międzynarodowych konferencji naukowych, prowadziła zajęcia popularyzujące naukę w ramach Festiwalu Nauki oraz dla Uniwersytetu Trzeciego Wieku oraz była opiekunem Koła Naukowego Chemików „Koronan”. Uczestniczyła też w pracach komisji konkursowych przyznających stypendia doktorskie powoływanych przez Marszałka Województwa Opolskiego oraz Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego.

Za szczególne osiągnięcia naukowe była trzykrotnie nagradzana indywidualnymi nagrodami Rektora Uniwersytetu Opolskiego. Dorobek organizacyjny dr hab. Brody można uznać za zadowalający, pewnym niedoborem mogą być tylko skromne efekty w zakresie pozyskiwania środków na badania naukowe.

Z przedstawionej powyżej charakterystyki działalności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej dr hab. Małgorzaty Brody jawi się obraz w pełni dojrzałej badaczki, inicjującej nowe kierunki badań, prowadzącej interdyscyplinarną współpracę naukową oraz aktywnie uczestniczącą w wychowaniu nowej kadry naukowej.

Reasumując stwierdzam, że nadesłane materiały odpowiadają wymaganiom ustawowym związanym z wystąpieniem o tytuł profesora i w mojej opinii dr hab. Magdalena Broda spełnia warunki niezbędne do uzyskania tej godności. Posiada uznany na świecie dorobek naukowy, dysponuje bogatym doświadczeniem badawczym, dydaktycznym i organizacyjnym. W związku z powyższym wnioskuję o dopuszczenie Pani dr hab. Magdaleny Brody do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania tytułu naukowego profesora.



Prof. dr hab. inż. W. Andrzej Sokalski