

Prof. dr hab. Marek L. Główka,
profesor zwyczajny
Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej
Politechniki Łódzkiej

Łódź, 21.05.2015.

RECENZJA HABILITACJI pt. „Analiza strukturalna glikozydów za pomocą metod teoretycznych i eksperymentalnych” oraz całokształtu dorobku zawodowego doktora Tomasza Gubicy

Recenzja została opracowana w związku z powołaniem niżej podpisanego na recenzenta w postępowaniu habilitacyjnym doktora Tomasza Gubicy, prowadzonym przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. W związku z powołaniem oświadczam, że nigdy nie współpracowałem z Habilitantem, nie mamy wspólnych publikacji, i że nie istnieją między nami konflikty interesów.

Podstawowe dane. Dr Tomasz Gubica otrzymał stopień doktora nauk chemicznych w 2007 roku na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego na podstawie rozprawy pt.: „Analiza strukturalna glikozydów za pomocą metod teoretycznych i eksperymentalnych”, wykonanej pod kierunkiem prof. dr hab. Andrzeja Temeriusza. W zasadzie cały Jego dotychczasowy dorobek wiąże się z tą tematyką.

Po dwu- i półrocznej pracy na macierzystym Wydziale na stanowisku technicznym a następnie przez kilka miesięcy na stanowisku adiunkta, dr Gubica kontynuował swoją karierę akademicką na Wydziale Farmaceutycznym Warszawskiego Uniwersytetu Medycznego od października 2010 roku, również na stanowisku adiunkta.

Działalność dydaktyczna i organizacyjna. Jako pracownik naukowo-dydaktyczny doktor Tomasz Gubica prowadził zajęcia różnego typu, przede wszystkim ćwiczenia i laboratoria z chemii organicznej w czasie pracy na Uniwersytecie Warszawskim oraz z chemii fizycznej w czasie zatrudnienia przez Warszawski Uniwersytet Medyczny. Nie jestem w stanie określić poziomu prowadzonych zajęć, tym bardziej, że nigdy nie miałem możliwości wysłuchania żadnego z publicznych wystąpień Habilitanta. Sądzę jednak, że powierzenie Mu kierowania 10 pracami magisterskimi oraz 3 licencjackimi świadczy o co najmniej pozytywnej ocenie pracy Jego dydaktycznej. O poważnym traktowaniu obowiązków dydaktycznych świadczy uczestnictwo w charakterze współautora oraz edytora skryptu do prowadzonych zajęć laboratoryjnych z chemii fizycznej.

Habilitant ma też widoczny dorobek popularyzatorski, obejmujący przygotowanie pokazów i warsztatów dla uczniów, wygłoszenie referatu dla koła naukowego oraz dla nauczycieli szkół warszawskich. W materiałach habilitacyjnych dr Gubica nie wymienia żadnych prac organizacyjnych, co wydaje mi się prawie nieprawdopodobne. Niemniej trzeba zauważyć, że aktywność w tej materii w większej mierze zależy od kierownictwa niż od pracownika, i że ten aspekt oceny dorobku jest najmniej istotny (choć chętnie widziany) w postępowaniu zmierzającym do uzyskania niższych stopni naukowych.

Dorobek naukowy. Dorobek naukowy doktora Tomasza Gubicy jest przyzwoity. Obejmuje 18 oryginalnych publikacji w czasopiśmie o międzynarodowej cyrkulacji, w tym 13 ogłoszonych po uzyskaniu stopnia doktora, przy czym część z nich związana jest bezpośrednio z pracą doktorską. We wszystkich publikacjach Habilitanta zwraca uwagę znaczna liczba współautorów publikacji, średnio było ich sześć.

Prace Habilitanta ukazały się w czasopismach specjalistycznych i ogólnochemicznych o czynniku wpływu pomiędzy 1 a 3. Najwięcej prac (osiem) zostało opublikowanych w *Carbohydrate Research* (IF około 2) oraz po trzy w *Journal of Molecular Structure* (IF 1.4-1.6) i w *Journal of Physical Organic Chemistry* (IF 1.5-2.0). Z pozostałych czasopism warto zauważyć *Tetrahedron* (IF 2.8), w którym zostały ogłoszone 2 prace w 2014 roku. Sumaryczny IF wszystkich 18 publikacji wynosi 35 a średni prawie 2. W odniesieniu do prac składających się na habilitację (H1-H8) sumaryczny IF wynosi 16.5, co daje zbliżoną do powyższej wartość średnią dla jednej pracy. W przypadku zastosowania obecnej punktacji Ministerstwa, średnia liczba punktów przypadająca na jedną publikację „habilitacyjną” wynosiłaby 26, a więc całkiem nieźle. Prace doktora Tomasza Gubicy były cytowane łącznie 32 razy (bez autocytowań). Jest to wynik niezły jak na dosyć krótki okres (10 lat), jaki upłynął od ukazania się pierwszej pracy do chwili wszczęcia postępowania habilitacyjnego.

Ważnym elementem życia naukowego są wystąpienia konferencyjne. Dr Tomasz Gubica wymienił w dostarczonych materiałach pięć komunikatów ustnych oraz jeden wykład, nie licząc wystąpień posterowych przed uzyskaniem stopnia doktora. Oprócz jednego, wszystkie komunikaty zostały wygłoszone na międzynarodowych konferencjach naukowych za granicą po roku 2008 (po doktoracie). Na podstawie cytawalności oraz aktywności konferencyjnej można stwierdzić, że Habilitant został zauważony przez międzynarodowe środowisko naukowe.

Co do współpracy naukowej, wynikała ona przede wszystkim ze stosowania w prowadzonych przez Habilitanta badaniach wielu technik badawczych, bezpośrednio dla Niego niedostępnych oraz z interdyscyplinarnego charakteru prowadzonych badań. Pobocznym skutkiem tego jest duża liczba autorów większości prac doktora Tomasza Gubicy, o czym pisałem już wcześniej. Są wśród nich zarówno liderzy jak i specjaliści ze współpracujących zespołów badawczych i wszyscy pracują na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Dotyczy to również publikacji „habilitacyjnych”.

Aktywność Habilitanta w staraniach o fundusze na badania była niezbyt duża. Właściwie do osiągnięć w tym zakresie można zaliczyć jedynie uzyskanie grantu z funduszy młodych naukowców w okresie początkowej pracy w Warszawskim Uniwersytecie Medycznym, gdyż tzw. grant promotorski podczas studiów doktoranckich zapewne przygotował promotor.

Znaczącym osiągnięciem zawodowym doktora Tomasza Gubicy była też synteza i dogłębna charakterystyka struktury sporej liczby związków przy pomocy różnych metod. Ciekawe wydaje się tematyka „dekstrynowa” oraz ewentualny wpływ różnego typu dekstryn na katalityczne reakcje określonych enzymów.

Publikacje wskazane jako habilitacyjne. Prace „habilitacyjne” są w zasadzie reprezentatywne dla całego dorobku doktora Tomasza Gubicy i stąd wszystkie uwagi odnoszące się do całości dorobku naukowego można powtórzyć przy tej okazji. Choć wszystkie prace Habilitanta stanowią przykład solidnej i profesjonalnej roboty, trudno powiedzieć, że są wybitne. Przypuszczam, że trudno byłoby „sprzedać” je dużo lepiej. Pewnym usprawiedliwieniem niezbyt imponującej liczby cytowań dorobku doktora Gubicy może być krótki czas jego (dorobku) cyrkulacji, jako że prace ukazały się w latach 2005-20014. Jako oczywisty, pozytywny element traktuję pierwsze miejsce Habilitanta wśród licznych autorów większości prac. Tylko w dwóch publikacjach (H1 oraz H9) jest On na drugim miejscu, przy czym w pierwszej z nich pierwszym autorem jest specjalistka z

zakresu spektroskopii NMR ciała stałego, natomiast w ostatniej pracy pierwszy autor jest doktorantem, wykonującym obliczenia konformacyjne.

Próbując wyważyć wkład Habilitanta do nauki nie mogę pominąć ogólnej uwagi odnoszącej się do prac interdyscyplinarnych, a taki właśnie charakter nosi recenzowany dorobek. Wyniki badań opisanych w dorobku publikacyjnym doktora Gubicy zostały otrzymane wieloma metodami i technikami badawczymi, co jest ich zaletą. Z drugiej strony powoduje to zaangażowanie w opisane badania wiele osób i oczywiście wielu autorów publikacji, jak również kłopoty z wyraźnym rozgraniczeniem wkładu poszczególnych specjalistów w końcowy wynik. Nie można też pominąć faktu, że część otrzymanych wyników pochodzi ze standardowych badań (pomiarów), co dotyczy również wyznaczania struktury molekularnej w kryształach (ssNMR i XRD) czy też obliczeń konformacyjnych. W przypadku recenzowania dorobku kluczową sprawą staje się wyodrębnieniu wkładu Habilitanta w objęte habilitacją osiągnięcia naukowe. Przyznaję, że kluczowymi elementami badań są: sam pomysł, koncepcja jego realizacji oraz wyciągnięte wnioski, za które odpowiadał Habilitant. Niemniej trudno zakładać bierną rolę bardziej doświadczonych badaczy, w tym profesorów występujących jako współautorzy publikacji „habilitacyjnych”. W rezultacie, po szacunkowym odjęciu dokonań współautorów publikacji (przypominam, że średnio było ich pięcioro poza Habilitantem), trochę zbyt optymistycznie wyglądają Jego „oszacowane udziały własne” w wysokości średnio 63%.

Uwagi szczegółowe. Do samego autoreferatu i wymienionych tam przez Habilitanta najważniejszych Jego osiągnięć, mam następujące uwagi szczegółowe.

1. Nie zgadzam się ze stwierdzeniem Habilitanta, że (cyt.) *„Takie podejście badawcze do opisu właściwości strukturalnych związków organicznych jest nowością naukową.”* (str. 8). Dr Gubica wyjaśniał wcześniej, że (cyt.) *„W swoim osiągnięciu naukowym pokazałem różne sposoby wzajemnego wykorzystania XRD, PXRD, ssNMR i modelowania molekularnego. Korzystałem z komplementarności tych metod eksperymentalnych i teoretycznych, w sytuacjach, kiedy łączne ich wykorzystanie było niemożliwe.”* Według recenzenta wzajemne relacje, komplementarność i różnice pomiędzy wymienionymi metodami badawczymi są od dawna dobrze znane i wykorzystywane, i to niezależnie od rodzaju badanych związków. Co więcej, wybrane do badań kryształy pochodnych glikozydów sprawiają wrażenie trochę przypadkowych z punktu widzenia krystalochemicznych właściwości, które w decydujący sposób zależały od ich zdolności do tworzenia wiązań wodorowych. Oczywiście rozumiem, że nie wszystkie związki, jakimi dysponował Habilitant, „chciały” tworzyć piękne monokryształy (lub nawet mikrokryształy do badań proszkowych), ale nie należy zbyt podkreślać ich krystalochemicznej jednorodności. Zresztą takie same wyniki (*„W swoim osiągnięciu naukowym pokazałem różne sposoby wzajemnego wykorzystania XRD, PXRD, ssNMR i modelowania molekularnego”*) można było otrzymać dla każdego rodzaju związków. Stwierdza to nawet sam Habilitant (patrz ostatnie zdanie na str. 16, przytoczone dalej).

2. W opracowaniu jest wiele sformułowań niezbyt ścisłych, żargonowych lub niejasnych, których należałoby się wystrzegać. Charakterystyczne są poniższe przykłady:

- (mapy adiabatyczne) *„...dwa najgłębsze minima miały podobną energię, ale różniły się znacząco konformacją.”* Minima nie mają konformacji, odzwierciedlają one czy też określają odpowiednie konformacje.

- *„Taka obserwacja (ta o dwóch minimach) tłumaczy fakt, że cząsteczki związku 2 nie są w stanie utworzyć sieci krystalicznej”*

- „... że związek jest bardzo higroskopijny, a więc pomiar XRD jest trudny, o ile w ogóle możliwy, do przeprowadzenia.” Można przecież pomiar zrobić w kapilarze lub otoczyć kryształ warstwą ochronną, a nawet zamrozić.

- Moje wątpliwości budzi stwierdzenie Habilitanta, że (cyt.) „Znajomość najtrwalszej konformacji cząsteczki jest szczególnie istotna w dokowaniu, tj. obliczeniach mających na celu określenie najlepszego dopasowania molekularnego między ligandem a receptorem ...” O ile wiem, podczas dokowania niezmiennie są jedynie sztywne fragmenty molekularne a zakres swobody konformacyjnej labilnych fragmentów jest określona energią powinowactwa.

- „Opracowałem jednak skuteczną metodologię (nie wiedziałem, że nie jest oczywista i że nie była znana), która pozwala zastąpić pomiary XRD za pomocą obliczeń DFT i spektroskopii ssNMR. Ponadto określiłem, w nowatorski sposób, właściwości strukturalne 31 glikozydów. Na czym polega ten nowatorski sposób? Co to są właściwości strukturalne? Czy to są wartości parametrów geometrycznych związanych ze strukturą molekularną oraz krystaliczną (nie krystalograficzną)?

- „Kolejnym celem mojej rozprawy habilitacyjnej było wykazanie, że metody eksperymentalne (XRD, PXRD, ssNMR i DSC) oraz teoretyczne (modelowanie molekularne i algorytm genetyczny) wzajemnie się uzupełniają i pozwalają otrzymać wiarygodne informacje strukturalne nawet w trudnych eksperymentalnie przypadkach.” (Inne sformułowanie wyżej wymienionego osiągnięcia.)

- I dalej „... osiągnięciem było przeprowadzenie wieloetapowych syntez i otrzymanie 27 glikozydów. W publikacjach habilitacyjnych zajmowałem się pochodnymi sacharydów. Sądzę jednak, że zastosowana przeze mnie metodologia badań nie ogranicza się do cukrów i ma charakter ogólny. W moim osiągnięciu naukowym zaprezentowałem nowe podejście w dziedzinie badań strukturalnych. Nie spotkałem się bowiem w literaturze naukowej z tak postawionym celem badawczym.” A może nie można tak postawić celu badawczego? To by tłumaczyło jego brak w literaturze naukowej.

3. Zastanawia mnie używanie różnych form narracji w autoreferacie. Czy użycie czasami formy bezosobowej wskazuje na czynności dokonywane nie przez Habilitanta?

Podsumowanie. Ustawa oraz odpowiednie rozporządzenie Ministra wymagają od osoby ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego wykazania się przede wszystkim znacznym dorobkiem naukowym osiągniętym indywidualnie i wskazującym na umiejętność formułowania i rozwiązywania problemów naukowych. Dorobek musi być nie tylko liczbowo znaczny ale również mieć znaczny ciężar gatunkowy.

Podstawowe parametry scjentometryczne, odnoszące się do dorobku doktora Tomasza Gubicy, zebrane w ciągu 10 lat Jego pracy naukowej, wynoszą: liczba publikacji - 18 (z tego 13 po doktoracie), sumaryczny czynnik wpływu IF=35, średni IF około 2, 57 cytowań (32 bez autocytowań), indeks Hirsha równy 5, wygłoszenie pięciu ustnych komunikatów i jednego wykładu na konferencjach międzynarodowych, żywa działalność popularyzatorska i dydaktyczna.

Całkowity dorobek doktora Tomasza Gubicy można więc ocenić jako średni, w dużej części raczej odtwórczy niż oryginalny, choć zawiera bez wątpienia elementy nowości. Myślę, że m.in. Habilitantowi zabrakło długoterminowego stażu zagranicznego, który wprawdzie nie gwarantuje rozwoju naukowego ale daje na to większą szansę, znacznie ułatwia nawiązanie ważnych kontaktów międzynarodowych, rozszerza horyzonty naukowe, uczy innego podejścia do rozwiązywanych problemów i lepiej pozwala ocenić własne dokonania.

W recenzowanym przypadku prace ukazały się w czasopiśmie średniego kalibru a odzew na nie był niezły. (W swojej opinii uwzględniłem obserwowany od kilku lat znaczny spadek znaczenia specjalistycznych i klasycznych czasopism strukturalnych). Publikacje pokazują dojrzałość naukową głównego autora (zakładając jego wiodącą rolę oraz wkład) oraz zdolność do samodzielnego podejmowania i rozwiązywania złożonych zagadnień naukowych.

Na podstawie cytowalności oraz aktywności konferencyjnej można stwierdzić, że Habilitant został zauważony przez międzynarodowe środowisko naukowe.

Kandydat ma solidny dorobek dydaktyczny jak również organizacyjny, świadczący o umiejętności zorganizowania w przyszłości zespołu i kształcenia kadr.

Za słabsze elementy dorobku uważam:

- niewielką oryginalność tematyki,
- standardową metodykę i zakres badań, częściowo wykonywanych przez kooperantów,
- dużą liczbę autorów prawie wszystkich prac (również habilitacyjnych) - średnio było ich 6.

Konkluzja

Rozpatrując całokształt dorobku doktora Tomasza Gubicy można uznać, że Jego osiągnięcia zawodowe **spełniają w wystarczającym stopniu wymogi**, sformułowane zarówno w Ustawie z 14.03.2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, w Rozporządzeniu Ministra MEN z 15.12.2005 roku w sprawie szczegółowego trybu przeprowadzania czynności w przewodach doktorskim i habilitacyjnym oraz w postępowaniu o nadanie tytułu profesora, w Rozporządzeniu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z 1.09.2011 roku w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego (wszystkie z późniejszymi zmianami), jak również ogólnie przyjęte w środowisku akademickim standardy.

W rezultacie wnioskuję o dopuszczenie dr Tadeusza Gubicy do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

