

**Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, stanowiących  
znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny**



**Instytut Chemii Organicznej  
Polskiej Akademii Nauk**

**OD NIEPEŁNEGO DO WYCZERPUJĄCEGO OPISU  
STRUKTURALNEGO ZWIĄZKÓW BIOAKTYWNYCH ZA  
POMOCA SPEKTROMETRII RUCHLIWOŚCI JONÓW  
SPRZEŻONEJ ZE SPEKTROMETRIĄ MAS**

dr Magdalena Maja Zimnicka  
Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk  
Warszawa, Polska

Załącznik 5 do wniosku o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora  
habilitowanego

10 czerwca 2022 r.

**I. WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH,  
o których mowa w art. 219 ust. 1. pkt 2 Ustawy**

**I. 1. Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b ustawy;**

**Tytuł osiągnięcia naukowego:**

“Od niepełnego do wyczerpującego opisu strukturalnego związków bioaktywnych za pomocą spektrometrii ruchliwości jonów sprzężonej ze spektrometrią mas”

**I. 2. Lista publikacji potwierdzających osiągnięcie:**

(\* - autor korespondencyjny)

**IF (rok publikacji)** – Na podstawie mostwiedzy.pl – 02.06.2022

**IF<sub>5-letni</sub>** – Na podstawie Web of Science – 02.06.2022

**Punkty Ministerialne** – według zał. do komunikatu Ministra Edukacji i Nauki z dnia 9.02.2021

Lp.	Artykuł	IF (rok publikacji)	IF <sub>5-letni</sub>	Punkty Ministerialne
A1	<p>A. Troć, <u>M. Zimnicka*</u>, W. Danikiewicz</p> <p>“Separation of Catechin Epimers by Complexation Using Ion Mobility Mass Spectrometry”</p> <p><i>Journal of Mass Spectrometry</i> 2015, 50, 542-548</p> <p><b>Mój wkład w powstanie publikacji:</b> (moja szczegółowa deklaracja i deklaracje pozostałych współautorów dostępne są w załączniku 6)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- konceptualizacja,</li> <li>- analiza formalna,</li> <li>- badania (obliczenia teoretyczne),</li> <li>- nadzór (pomiary TWIMS),</li> <li>- pisanie – pierwotny projekt, i pisanie – recenzja &amp; redakcja.</li> </ul> <p><b>Mój udział procentowy szacuję na 70%.</b></p>	2,541	2,03	70
A2	<p>A. Troć, <u>M. Zimnicka*</u>, M. Koliński, W. Danikiewicz</p> <p>“Structural Elucidation of <math>\beta</math>-Lactam Diastereoisomers through Ion Mobility Mass Spectrometry Studies and Theoretical Calculations”</p> <p><i>Journal of Mass Spectrometry</i> 2016, 51, 282-290</p> <p><b>Mój wkład w powstanie publikacji:</b> (moja szczegółowa deklaracja i deklaracje pozostałych współautorów dostępne są w załączniku 6)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- konceptualizacja,</li> <li>- analiza formalna,</li> </ul>	2,381	2,03	70

	<ul style="list-style-type: none"> <li>- badania (obliczenia teoretyczne),</li> <li>- nadzór (pomiary TWIMS),</li> <li>- pisanie – pierwotny projekt, i pisanie – recenzja &amp; redakcja.</li> </ul>			
<b>A3</b>	<p><u>M. Zimnicka*</u>, Anna Troć</p> <p>“Acid-Based Approach for Separation of Peptide Epimers using IM-MS”</p> <p><i>Journal of Mass Spectrometry</i> 2019, 54, 620-628</p> <p><b>Mój wkład w powstanie publikacji:</b> (moja szczegółowa deklaracja i deklaracje pozostałych współautorów dostępne są w załączniku 6)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- konceptualizacja,</li> <li>- analiza formalna,</li> <li>- badania (pomiary TWIMS &amp; obliczenia teoretyczne),</li> <li>- pisanie – pierwotny projekt, i pisanie – recenzja &amp; redakcja.</li> </ul> <p><b>Mój udział procentowy szacuję na 90%.</b></p>	<b>1,671</b>	<b>2,03</b>	<b>70</b>
<b>A4</b>	<p><u>M. Zimnicka*</u></p> <p>“Crown Ethers as Shift Reagents in Peptide Epimer Differentiation - Conclusions from Examination of <i>ac</i>-(H)FRW-NH<sub>2</sub> Peptide Sequences”</p> <p><i>International Journal for Ion Mobility Spectrometry</i> 2020, 23, 177-188</p> <p><b>Mój wkład w powstanie publikacji:</b> (moja szczegółowa deklaracja dostępna jest w załączniku 6)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- konceptualizacja,</li> <li>- analiza formalna,</li> <li>- badania (pomiary TWIMS),</li> <li>- pisanie – pierwotny projekt, i pisanie – recenzja &amp; redakcja.</li> </ul> <p><b>Mój udział procentowy szacuję na 100%.</b></p>	<b>2,8<sup>†</sup></b>	<b>2,94<sup>†</sup></b>	<b>70</b>
<b>A5</b>	<p><u>M. Zimnicka*</u>, A. Troć, M. Ceborska, M. Jakubczak, M. Koliński, W. Danikiewicz</p> <p>“Structural Elucidation of Specific Noncovalent Association of Folic Acid with Native Cyclodextrins Using an Ion Mobility Mass Spectrometry and Theoretical Approach”</p> <p><i>Analytical Chemistry</i> 2014, 86, 9, 4249–4255</p> <p><b>Mój wkład w powstanie publikacji:</b> (moja szczegółowa deklaracja i deklaracje pozostałych współautorów dostępne są w załączniku 6)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- konceptualizacja,</li> </ul>	<b>5,636</b>	<b>6,755</b>	<b>140</b>

	<ul style="list-style-type: none"> <li>- analiza formalna,</li> <li>- badania (pomiar TWIMS &amp; obliczenia teoretyczne),</li> <li>- pisanie – pierwotny projekt, i pisanie – recenzja &amp; redakcja.</li> </ul> <p><b>Mój udział procentowy szacuję na 70%.</b></p>			
<b>A6</b>	<p><u>M. Zimnicka*</u>, E. Kalenius, J. Jurczak, W. Danikiewicz</p> <p>“Ion Mobility Mass Spectrometry - an Efficient Tool for the Analysis of Conformational Switch of Macrocyclic Receptors upon Anion Binding”</p> <p><i>Analyst</i>, 2021, 146, 5337-5346</p> <p><b>Mój wkład w powstanie publikacji:</b> (moja szczegółowa deklaracja i deklaracje pozostałych współautorów dostępne są w załączniku 6)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- konceptualizacja,</li> <li>- analiza formalna,</li> <li>- badania (pomiar TWIMS &amp; obliczenia teoretyczne),</li> <li>- pisanie – pierwotny projekt, i pisanie – recenzja &amp; redakcja.</li> </ul> <p><b>Mój udział procentowy szacuję na 70%.</b></p>	<b>4,77</b>	<b>4,232</b>	<b>100</b>
<b>Podsumowanie :</b>				
$\Sigma IF$		<b>16,999</b>	<b>17,077</b>	<b>520</b>
$\Sigma(IF + CiteScore)$		<b>19,799</b>	<b>20,017</b>	

‡ - Cite Score jest podany (mostwiedzy.pl). IF nie jest dostępny.

## II. WYKAZ AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ

### II.1. Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.2).

**IF<sub>5-letni</sub>** – Na podstawie Web of Science – 02.06.2022

**Punkty Ministerialne** – według zał. do komunikatu Ministra Edukacji i Nauki z dnia 9.02.2021

\* - autor korespondencyjny: Magdalena Zimnicka

### Okres przed uzyskaniem stopnia doktora

Lp.	Artykuł	IF <sub>5-letni</sub>	Punkty Ministerialne
1	D. Gryko, <u>M. Zimnicka</u> , R. Lipiński; <i>J. Org. Chem.</i> 2007, 72, 964; Brønsted Acids as Additives for the Direct Asymmetric Aldol Reaction Catalyzed by l-Prolinethioamides. Direct Evidence for Enamine–Iminium Catalysis	4.082	140
2	W. Danikiewicz, T. Bieńkowski, D. Kozłowska, <u>M. Zimnicka</u> ; <i>J. Am. Soc. Mass Spectrom.</i> 2007, 18, 1351; Aromatic Nucleophilic Substitution (S <sub>N</sub> Ar) Reactions of 1,2- and 1,4-Halonitrobenzenes and 1,4-Dinitrobenzene with Carbanions in the Gas Phase	3.323	70
3	Leszczynska, B. Burzyńska, D. Plochocka, J. Kaminska, <u>M. Zimnicka</u> , et al.; <i>System. PLoS ONE</i> 2009, 4(12): e8499. doi:10.1371/journal.pone.0008499; Investigating the Effects of Statins on Cellular Lipid Metabolism Using a Yeast Expression.	3.788	100

### Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego

Lp.	Artykuł	IF <sub>5-letni</sub>	Punkty Ministerialne
1	T. W. Chung, C. L. Moss, <u>M. Zimnicka</u> , R. S. Johnson, R. L. Moritz, F. Tureček; <i>J. Am. Soc. Mass Spectrom.</i> 2011, 22, 13; Tunable Fixed-Charge Tags for Electron Transfer Dissociation of Peptides.	3.323	70
2	<u>M. Zimnicka</u> , J. A. Gregersen, F. Tureček; <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2011, 133 (26), 10290; A Stable Aminothioketyl Radical in the Gas Phase.	15.801	200
3	<u>M. Zimnicka</u> , C. L. Moss, T. W. Chung, R. Hui, F. Tureček; <i>J. Am. Soc. Mass Spectrom.</i> 2011, 23, 608; Tunable Charge Tags for Electron-Based Methods of Peptide Sequencing. Design and Application.	3.323	70
4	<u>M. Zimnicka</u> , T. W. Chung, C. L. Moss, F. Tureček; <i>J. Phys. Chem. A</i> , 2012, 117, 1265; Perturbing Peptide Cation-Radical Electronic States by Thioamide Groups: Formation, Dissociations, and Energetics of Thiopeptide Cation-Radicals	2.725	100
5	M. Ceborska, <u>M. Zimnicka</u> , M. Pietrzak, et al., <i>Org. Biomol. Chem.</i> , 2012, 10, 5186;	3.397	100

	Structural diversity in native cyclodextrins/folic acid complexes - from [2]-rotaxane to exclusion compound.		
6	<u>M. Zimnicka</u> , B. Wileńska, O. Sekiguchi, E. Uggerud, W. Danikiewicz; <i>J. Mass Spectrom.</i> 2012, 47, 425; Reactions of nitrophenide and halonitrophenide ions with acrylonitrile and alkyl acrylates in the gas phase. Addition to the carbonyl group vs. Michael addition.	2.03	70
7	<u>M. Zimnicka*</u> , O. Sekiguchi, E. Uggerud, W. Danikiewicz; <i>Int. J. Mass Spectrom.</i> 2012, 316-318, 76; Reactions of nitrophenide and halonitrophenide ions with acrylonitrile and alkyl acrylate in the gas phase. The case of [M-2] <sup>-</sup> ion formation.	1.799	70
8	P. Polcyn, P. Zielinska, <u>M. Zimnicka*</u> , A. Troc, P. Kalicki, J. Solecka, A. Laskowska, Z. Urbanczyk-Lipkowska, <i>Molecules</i> , 2013, 18, 7120; Novel antimicrobial peptide dendrimers with amphiphilic surface and their interactions with phospholipids – insight from mass spectrometry.	4.588	140
9	<u>M. Zimnicka</u> , W. Danikiewicz, <i>J. Am. Soc. Mass Spectrom.</i> , 2015, 26, 1191; Gas-Phase Anionic $\sigma$ -Adduct (Trans)formations in Heteroaromatic Systems.	3.323	70
10	W. Danikiewicz, <u>M. Zimnicka</u> , <i>Mass Spectrom. Rev.</i> , 2016, 35, 123; Negative Ion Gas-Phase Chemistry of Arenes	9.617	140
11	M. Ceborska, <u>M. Zimnicka</u> , M. Wszelaka-Rylik, A. Troć, <i>J. Mol. Struct.</i> , 2016, 1109, 114; Characterization of Folic Acid/Native Cyclodextrins Host–Guest Complexes in Solution	2.618	70
12	M. Ceborska, <u>M. Zimnicka</u> , A. Kowalska, K. Dąbrowa, <i>Beilstein J. Org. Chem.</i> 2017, 13, 2252. Structural diversity in the host–guest complexes of the antifolate pemetrexed with native cyclodextrins: gas phase, solution and solid state studies	2.785	70
13	<u>M. Zimnicka*</u> , <i>J. Phys. Chem. A</i> , 2018, 122, 7819. Conformational Features of Thioamide-Containing Dipeptoids and Peptoid-Peptide Hybrids-Computational and Experimental Approaches	2.725	100
14	B. Kost, M. Brzeziński, <u>M. Zimnicka</u> , M. Socka, E. Wielgus, M. Słowianek, T. Biela, <i>Mat. Today Commun.</i> 2020, 25, 101605;	3.145	70

	PLA Stereocomplexed Microspheres Modified with Methyl-beta-Cyclodextrin as an Atropine Delivery System. Synthesis and Characterization		
15	<u>M. Zimnicka*</u> , K. Kozłowska, W. Danikiewicz, <i>J. Org. Chem.</i> 2020, 85, 8990; Beyond Size Complementary Factors in Anion-Tetralactam Macrocyclic Complexes: From Intrinsic Gas-Phase to Solvent-Predicted Stabilities	4.082	140
16	M. Ceborska, K. Dąbrowa, J. Cędrowski, <u>M. Zimnicka</u> , <i>J. Mol. Struct.</i> 2022, 1250, 131904; Hydrogen-bonded supramolecular assemblies of folic acid with simple hexoses	2.618	70
17	H. Butkiewicz, S. Kosiorek, V. Sashuk, M. Zimnicka, O. Danylyuk <i>Cryst. Growth Des.</i> 2022, 22, 2854–2862 Inclusion of Pentamidine in Carboxylated Pillar[5]arene: Late Sequential Crystallization and Diversity of Host–Guest Interactions	4.016	100

**II. 2. Wykaz wystąpień na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych.**

**Okres przed uzyskaniem stopnia doktora**

Lp.	Autorzy, Tytuł	Konferencja	Data i Miejsce	Wystąpienie
1	<u>M. Zimnicka</u> , W. Danikiewicz The use of ESI-MS for Establishing the Relative Equilibrium Constants of the Reaction of Aliphatic Amines with 1,3,5-Trinitrobenzene	23rd Informal meeting on Mass Spectrometry	15-19.05.2005 Fiera di Primerio, Włochy	Plakat
2	<u>M. Zimnicka</u> Generation and reactions of anionic $\sigma$ -adducts of nitrothiophenes and nitrofurans with C-H acids in a gas phase	24 <sup>th</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	14-18.05.2006 Ustroń, Polska	Wystąpienie ustne
3	W. Danikiewicz, <u>M. Zimnicka</u> Calculations of the Gas-Phase Proton Affinities of Aromatic and Heteroaromatic Carbanions: A Comparison of Gaussian- <i>n</i> , CBS and DFT Methods	17 <sup>th</sup> International Mass Spectrometry Conference	27.08-01.09.2006 Praga, Republika Czeska	Plakat

4	<u>M. Zimnicka</u> , W. Danikiewicz Aromatic Nucleophilic Substitution (S <sub>N</sub> Ar) Reactions of 1,2- and 1,4-Halonitrobenzenes and 1,4-Dinitrobenzene with Carbanions in a Gas Phase	17 <sup>th</sup> International Mass Spectrometry Conference	27.08-01.09.2006 Praga, Republika Czeska	Plakat
5	<u>M. Zimnicka</u> A Study on the Halophenolate Anions Formation in the Gas Phase Reactions of Halonitrophenide Anions with C-H Acids	25 <sup>th</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	06-10.05.2007 Nyíregyháza-Sóstó, Węgry	Wystąpienie ustne
6	<u>M. Zimnicka</u> , W. Danikiewicz Reactions of Various Substituted Anions with Acrylonitrile and Alkyl Acrylates in the Gas Phase. Addition to the Carbonyl Group vs. Michael Addition	2 <sup>nd</sup> EuCheMS Chemistry Congress	16-20.09.2008 Turyn, Włochy	Plakat

**Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego**

No.	Authors and Title	Conference	Date and Place	Presentation
1	J. A Gregersen, <u>M. Zimnicka</u> , F. Turecek Protonated N-Methylthioacetamide as a Model Amino Acid Linker in Studying the Mechanism of Peptide Fragmentation	58 <sup>th</sup> ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics	23-27.05.2010 Salt Lake City, USA	Plakat
2	<u>M. Zimnicka</u> Fragmentation Mechanisms of Bioorganic Ions	Joint Conference of German Mass Spectrometry Society and Polish Mass Spectrometry Society	04-07.03.2012 Poznań, Polska	Wykład plenarny
3	<u>M. Zimnicka</u> , W. Danikiewicz Reactions of nitrophenide and halonitrophenide ions with acrylonitrile and alkyl acrylates in the gas phase. The case of [M-2] <sup>-</sup> ion formation	Joint Conference of German Mass Spectrometry Society and Polish Mass Spectrometry Society	04-07.03.2012 Poznań, Polska	Plakat



4	<u>M. Zimnicka</u> , A. Troć, M. Ceborska Mass spectrometry studies of structural diversity in cyclodextrins/folic acid complexes	30 <sup>th</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	29.04-3.05.2012 Olomouc, Republika Czeska	Plakat
5	M. Zimnicka ETD and ECD as Alternative Methods for Peptide Fragmentation. Amino Acid Labelling and its Influence on Peptide Fragmentation Mechanisms	Department of Chemistry, University of Wrocław	20.06.2012 Wrocław, Polska	Wykład na zaproszenie
6	<u>M. Zimnicka</u> Effect of metal coordination on the separation process in ion mobility cell	31 <sup>th</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	5-8.05.2013 Palermo, Włochy	Plakat
7	<u>M. Zimnicka</u> Insight into the structure of septoids and thioamide-containing peptoids by ion-mobility mass spectrometry (IMS)	61 <sup>nd</sup> ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics	9-13.06.2013 Minneapolis, USA	Plakat
8	A. Troć, <u>M. Zimnicka</u> , W. Danikiewicz Separation of catechin epimers by complexation using ion mobility mass spectrometry	32 <sup>nd</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	11-14.05.2014 Balaton, Węgry	Plakat
9	M. Zimnicka Gas-Phase Association Modes of Monopyrene Tweezers through Experimental and Theoretical Approches	33 <sup>rd</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	10-13.05.2015 Szczyrk, Polska	Wykład plenarny
10	A. Troć, <u>M. Zimnicka</u> , W. Danikiewicz Ion mobility Mass Spectrometry and Theoretical Calculations of $\beta$ -Lactams Diastereoisomers – Conformational Studies	33 <sup>rd</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	10-13.05.2015 Szczyrk, Poland	Plakat
11	<u>M. Zimnicka</u> Probing Molecular Recognition by Mass Spectrometry. A Case Study: Examination of Properties of Noncovalent Complexes of Selected Melanocortin Receptor Ligands	33 <sup>rd</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	10-13.05.2015 Szczyrk, Poland	Plakat

12	M. Zimnicka, B. Repeć, M. Ceborska Insight into the Noncovalent Associations of Folinic Acid and Pemetrexed with Native Cyclodextrins Using Mass Spectrometry-Based Techniques	21st International Mass Spectrometry Conference	20-26.08.2016 Toronto, Kanada	Plakat
13	<u>M. Zimnicka</u> Diversity of Peptide Diastereoisomers Examined by Ion Mobility Mass Spectrometry	21st International Mass Spectrometry Conference	20-26.08.2016 Toronto, Kanada	Plakat
14	M. Zimnicka Contribution of Mass Spectrometry-Based Techniques to Molecular Recognition	6 <sup>th</sup> Conference of Polish Mass Spectrometry Society, Miedzeszyn	22-26.04.2018 Miedzeszyn, Poland	Wykład na zaproszenie
15	M. Zimnicka Acid - Based Recognition of Diastereoisomeric Peptides using Ion Mobility Mass Spectrometry	22 <sup>nd</sup> International Mass Spectrometry Conference	26-31.08.2018 Florencja, Włochy	Plakat
16	<u>M. Zimnicka</u> , A. Wasilewska, K. Dabrowa, W. Danikiewicz Steric Structure and Stability of the Gas-Phase Complexes of Macrocyclic Receptors with Anions	22 <sup>nd</sup> International Mass Spectrometry Conference	26-31.08.2018 Florencja, Włochy	Plakat

### II. 3. Wykaz udziału w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji.

#### Okres przed uzyskaniem stopnia doktora

Lp..	Konferencja	Data i Miejsce	Funkcja
1	24 <sup>th</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	14-18.05.2006 Ustroń, Poland	Członkini Komitetu Organizacyjnego

**Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora  
habilitowanego**

Lp.	Konferencja	Data i Miejsce	F
1	33 <sup>rd</sup> Informal Meeting on Mass Spectrometry	10-13.05.2015 Szczyrk, Poland	Członkini Komitetu Organizacyjnego

**II. 4. Wykaz uczestnictwa w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.**

**Okres przed uzyskaniem stopnia doktora**

Grant	Informacja
Grant Promotorski (Ministry of Science and Higher Education)	Wykonawczyni  Temat: Badania właściwości i reakcji anionowych $\sigma$ -adduktów nitrozwiązków aromatycznych w fazie gazowej  Zakończony

**Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora  
habilitowanego**

Grant	Informacja
IUVENTUS PLUS (2012) IP2011 064171 Ministerstwo Nauki I Szkolnictwa Wyższego	Kierowniczka  Temat: Badania właściwości i struktury układu tioamidowego w modelowych ditiopeptoidach – potencjalnych jednostkach budulcowych w syntezie związków biologicznie czynnych.  Zakończony
SONATA (2012) 2011/03/D/ST4/03067 Narodowe Centrum Nauki	Kierowniczka  Temat: Rozpoznanie molekularne za pomocą spektrometrii mas: Badania właściwości niekowalencyjnych kompleksów ligandów receptorów melanokortinowych.  Zakończony

<p>GRANT OPUS 2016/21/B/ST4/03876 Narodowe Centrum Nauki</p>	<p>Główna wykonawczyni Temat: Badania struktury przestrzennej i trwałości kompleksów receptorów makrocyclicznych z anionami w fazie gazowej za pomocą techniki ruchliwości jonów sprzężonej ze spektrometrią mas i fragmentacji indukowanej kolizyjnie oraz metod obliczeniowych Zakończony</p>
<p>Projekt PLGrid Infrastruktura PLGrid</p>	<p>Kierowniczka Temat: Obliczenia teoretyczne jonów supramolekularnych W toku realizacji</p>

**II. 5. Wykaz członkostwa w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.**

**Okres przed uzyskaniem stopnia doktora**

Towarzystwo	Funkcja
Polskie Towarzystwo Spektrometrii Mas	Członkini

**Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego**

Towarzystwo	Funkcja
Polskie Towarzystwo Spektrometrii Mas	Członkini
American Society for Mass Spectrometry	Członkini
Females in Mass Spectrometry	Członkini

**II. 6. Wykaz staży w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.**

**Okres przed uzyskaniem stopnia doktora**

Instytucja	Aktywność naukowa	Okres
University of Oslo, Department of Chemistry, Mass Spectrometry Laboratory, Oslo, Norwegia	Tygodniowy staż naukowy w grupie badawczej prof. E. Uggeruda związany z realizacją projektu "Reactions of nitrophenide and halonitrophenide ions with acrylonitrile and alkyl acrylates in the gas phase: addition to the carbonyl group versus Michael addition".	Listopad, 2007 (1 tydzień)

**Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego**

Instytucja	Aktywność naukowa	Okres
University of Washington, Department of Chemistry, Seattle, USA	Staż podoktorski w grupie badawczej prof. F. Turečka związany z realizacją projektu „Implementation of the project on the development of ETD and ECD techniques for peptide sequencing”	Listopad 2009 – Grudzień 2010

**II. 7. Wykaz recenzowanych prac naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopiśmie międzynarodowych.**

**Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego**

Rodzaj	Informacja
Aktywność ewaluacyjna w formie przygotowania recenzji artykułów naukowych dla: <i>Molecules, J. Org. Chem., ACS Omega, Sci. Rep., Anal. Chem., APPA, Encyclopedia, J. Mass Spectrom., Int. J. Mass Spectrom., Rapid Commun. Mass Spectrom.</i>	> 15 Recenzji

## II. 8. Wykaz udziału w zespołach badawczych, realizujących projekty inne niż określone w pkt. II.9.

### Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego

Partner Naukowy	Informacja o udziale w projekcie – wykonanych badaniach
dr. hab. Magdalena Ceborska Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk, Warszawa, Polska	Badania niekowalencyjnych kompleksów kwasu foliowego i cyklodekstryn za pomocą spektrometrii mas i metod z nią sprzężonych. (4 opublikowane artykuły)
Prof. J. L. Sessler Department of Chemistry, University of Texas, Austin, USA	Badania swobodnej asocjacji monopirenów z wykorzystaniem IM-MS i obliczeń teoretycznych.
Prof. Antonello Filippi Department of Chemistry and Technologies of Drug, Sapienza-University of Rome, Rzym, Włochy	Badania strukturalne wybranych układów makrocyclicznych i ich kompleksów za pomocą IM-MS. (1 artykuł w trakcie przygotowania)
Prof. dr hab. T. Biela Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk, Łódź, Poland	Badania strukturalne kompleksów pochodnych cyklodekstryn i atropiny z wykorzystaniem IM-MS i obliczeń teoretycznych. (1 opublikowany artykuł)
dr. hab. O.Danylyuk Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk, Warszawa, Polska	Badania strukturalne kompleksów wybranych układów supramolekularnych z wykorzystaniem IM-MS i obliczeń teoretycznych. (1 artykuł opublikowany i 1 w trakcie przygotowania)

## III. WSPÓLPRZA Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

### III.1. Wykaz wykonanych ekspertyz lub innych opracowań wykonanych na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców.

Jako asystentka i członkini Laboratorium Analizy Substancji Bioaktywnych (02/2009 – 10/2009 i 03/2011 – 12/2012), przygotowałam ponad 10 raportów dotyczących identyfikacji i analizy zanieczyszczeń w lekach dla Zakładów Farmaceutycznych Polpharma.

#### IV. DANE NAUKOMETRYCZNE (na podstawie Web of Science – 02.06.2022)

##### Okres przed uzyskaniem stopnia doktora

Parametr	Informacja
Sumaryczny IF (IF <sub>5-letni</sub> ) publikacji	11,193
Liczba cytowań	149
Liczba cytowań bez autocytowań	146
Indeks Hirscha	3
Punkty Ministerialne	310

##### Okres pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego (z wyłączeniem okresu przed uzyskaniem stopnia doktora)

Parametr	Informacja
Sumaryczny IF (IF <sub>5-letni</sub> ) publikacji	71,915
Liczba cytowań	161
Liczba cytowań bez autocytowań	147
Indeks Hirscha	7
Punkty ministerialne	1650

##### Dane sumaryczne

Parametr	Informacja
Sumaryczny IF (IF <sub>5-letni</sub> ) publikacji	83,108
Liczba cytowań	310
Liczba cytowań bez autocytowań	293
Indeks Hirscha	9
Punkty ministerialne	1960

Magdalena Zimmicka  
(Podpis)