

## OCENA

### **osiągnięć dr Magdaleny Zimnickiej uzyskanych po otrzymaniu stopnia doktora i osiągnięcia naukowego pt. „Od niepełnego do wyczerpującego opisu strukturalnego związków bioaktywnych za pomocą spektrometrii ruchliwości jonów sprzężonej ze spektrometrią mas”**

Dr Magdalena Zimnicka ukończyła studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego w 2004 roku, a następnie pod promotorstwem prof. dr hab. Witolda Danikiewicza wykonała i obroniła w 2009 roku w Instytucie Chemii Organicznej PAN pracę doktorską pt. „Badanie właściwości i reakcji anionowych  $\sigma$ -adduktów nitrozwiązków aromatycznych w fazie gazowej”.

Po uzyskaniu stopnia doktora Habilitantka podjęła pracę w Instytucie Chemii Organicznej PAN początkowo na stanowisku asystentki, a następnie, od 2013 roku, adiunkta. W międzyczasie, w latach 2009-2020, odbyła roczny staż na Wydziale Chemii Uniwersytetu Waszyngtońskiego (Seattle, USA) w zespole kierowanym przez wybitnego badacza w zakresie spektrometrii mas – profesora Františka Turečka. Aktualnie, od 2012 roku, pełni funkcję kierowniczkę Zespołu 1a w Instytucie Chemii Organicznej PAN, będąc również członkinią Rady Naukowej tego Instytutu (od 06.2022).

I Osiągnięcia naukowo-badawcze Habilitantki, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt 2 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku Prawo o Szkolnictwie Wyższym

Dr Magdalena Zimnicka opublikowała w całym okresie swej aktywności zawodowej **26** prac (w tym **3** przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora i **6** potwierdzających osiągnięcie będące przedmiotem wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego) w czasopismach z listy Journal Citation Report. Łączny Impact Factor powyższych publikacji wynosi ponad **100** (w tym prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia naukowego doktora – prawie **90**), były one cytowane do chwili złożenia dokumentacji **293** razy (bez autocytowań), a wartość współczynnika Hirscha Autorki wynosi **9**. Na podkreślenie zasługuje fakt, że prace oryginalne były publikowane wyłącznie w szanowanych

czasopismach z listy JCR: m. in. w Journal of the American Chemical Society (JACS), Mass Spectrometry Reviews, Molecules, Journal of Organic Chemistry, Journal of the American Society of Mass Spectrometry. Oszacowany przez Autorkę Jej wkład w powstanie prac w zakresie 60-100 % (w obszarze osiągnięcia naukowego) świadczy o Jej wiodącej roli w planowaniu i realizacji prac badawczych.

W okresie swej aktywności naukowej dr Magdalena Zimnicka była kierownikiem projektu NCN Sonata, MNiSzW IUVENTUS PLUS, PLGrid - Infrastruktura PLGrid, a także główną wykonawczynią w projekcie NCN OPUS. W trakcie stażu podoktorskiego w USA uczestniczyła w realizacji projektu "Implementation of the project on the development of ETD and ECD techniques for peptide sequencing". Badania swe prowadzi (lub prowadziła) również we współpracy z ośrodkami zagranicznymi – Sapienza-University of Rome, University of Texas i krajowymi – Instytutem Chemii Fizycznej PAN i Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN. Pracując w Laboratorium Analizy Substancji Bioaktywnych IChO PAN przygotowała kilkanaście raportów dotyczących identyfikacji i oznaczania zanieczyszczeń w lekach dla Zakładów Farmaceutycznych Polpharma.

Dr Magdalena Zimnicka w trakcie swej pracy badawczej prezentowała wyniki prowadzonych prac na konferencjach naukowych w kraju i poza jego granicami (w Kanadzie, USA, Republice Czeskiej, we Włoszech i na Węgrzech), będąc współautorką dwóch wykładów plenarnych, dwóch wykładów na zaproszenie i 12 innych doniesień – po uzyskaniu stopnia naukowego doktora (a także 6 przed uzyskaniem stopnia doktora).

Podsumowując osiągnięcia Habilitantki i biorąc pod uwagę, że Jej prace były opublikowane w wiodących czasopismach z obszaru spektrometrii mas – z pełną odpowiedzialnością stwierdzam, że uznaję je za upoważniające do wystąpienia o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego.

## II Współpraca międzynarodowa, dorobek organizacyjny i popularyzacja nauki

Uczestnictwo dr Magdaleny Zimnickiej w konferencjach międzynarodowych i krajowych zostało przedstawione w ocenie osiągnięć naukowo-badawczych. Warty podkreślenia jest Jej udział w komitetach organizacyjnych dwóch kameralnych, szanowanych konferencji z cyklu Informal Meeting on Mass Spectrometry (w 2006 i 2015 roku).

Dr Magdalena Zimnicka brała udział w dwóch zagranicznych stażach naukowych: wspomnianym już powyżej, rocznym, w the University of Washington, Seattle, ale także krótszym, tygodniowym, w University of Oslo,



Mass Spectrometry Laboratory kierowanym przez prof. E. Uggeruda (2007 rok).

Habilitantka uczestniczyła (i uczestniczy) w działalności towarzystw naukowych, również międzynarodowych: Polskiego Towarzystwa Spektrometrii Mas, American Society for Mass Spectrometry oraz Females in Mass Spectrometry.

Niewątpliwym przejawem doceniania zdobywanej pozycji naukowej Habilitantki było powierzanie Jej do recenzji publikacji przesyłanych do redakcji renomowanych czasopism o zasięgu międzynarodowym, między innymi Analytical Chemistry, Journal of Organic Chemistry, Molecules, Jopurnal of Mass Spectrometry, International Journal of Mass Spectrometry, Rapid Communications in Mass Spectrometry.

W świetle powyższego oceniam łącznie aktywność Pani dr Magdaleny Zimnickiej w sferze współpracy międzynarodowej, popularyzacji nauki i dorobku organizacyjnego jako spełniającą w stopniu zadowalającym kryteria sprecyzowane w Rozporządzeniu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

III Osiągnięcie naukowe pt. „Od niepełnego do wyczerpującego opisu strukturalnego związków bioaktywnych za pomocą spektrometrii ruchliwości jonów sprzężonej ze spektrometrią mas”

Spośród 23 prac (z listy JRC) opublikowanych po otrzymaniu stopnia doktora 6 (IF 16,999; cytowanych 520 razy) zostało przez dr Magdalenę Zimnicką przedstawionych jako osiągnięcie naukowe podlegające ocenie w postępowaniu o uzyskanie stopnia doktora habilitowanego. Dr Magdalenę Zimnicką (jak już wspomniano w trakcie oceny całkowitego dorobku) należy traktować jako ich główną autorkę; swój udział w badaniach w obszarze osiągnięcia naukowego szacowała na poziomie 60-100%.

Osiągnięcie jest opisane w części 4 (Autoreferat) wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego uzupełnionego cyklem publikacji (folder Załącznik\_Attachment\_8). Opracowanie ma zwarty charakter i jest dobrym przewodnikiem po załączonych publikacjach. Pobieżne zapoznanie się z nim może stwarzać wrażenie, że tematyka prac Habilitantki była dwutorowa i niezbyt spójna z racji badania dwóch różnych klas związków: epimerycznych katechin i diastereomerycznych  $\beta$ -laktamów. Tak mechaniczny podział osiągnięcia należy jednak odrzucić uwzględniając rzeczywisty element

spajający – nowatorskie zastosowanie spektrometrii ruchliwości (mobilności) jonów (IM) uzupełnionej detekcją spektrometrii mas (ESI MS) do rozdzielania ekstremalnie podobnych strukturalnie indywiduów chemicznych i ich identyfikacji. Uzupełnienie wyników doświadczalnych obliczeniami teoretycznymi dostarczyło danych do dokonania analizy strukturalnej badanych substancji bioaktywnych.

Do głównych elementów nowości naukowej przedłożonego osiągnięcia zaliczyć można (w opinii recenzenta):

- dokonanie krytycznej oceny możliwości zastosowania spektrometrii ruchliwości jonów połączonej ze spektrometrią mas do selektywnego rozdzielania związków izomerycznych (zbudowanie podstaw przeprowadzenia cyklu badawczego będącego przedmiotem osiągnięcia),

- zbadanie wpływu struktury analitów i ich kompleksowania przez etery koronowe na efektywność rozdzielania epimerycznych oligopeptydów i stwierdzenie ograniczonego zastosowania mikrosolwatacji z użyciem wybranych do pracy jonów modyfikujących,

- zaproponowanie opisu strukturalnego kompleksów kwas foliowy-cyklodekstryna z podziałem na inkluzyjne i ekskluzyjne sposoby asocjacji z zastosowaniem spektrometrii ruchliwości jonów z detekcją spektrometrii mas i teoretycznych obliczeń przekrojów czynnych badanych jonów na podstawie pomiaru ich ruchliwości w gazie buforowym.

W ocenie opiniodawcy przedstawione osiągnięcie naukowe uzyskane po otrzymaniu stopnia doktora stanowi wartościowy wkład w rozwój dyscypliny uprawianej przez Habilitantkę. W świetle powyższego stwierdzam, że upoważnia ono do wystąpienia o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego.

#### IV Podsumowanie

W moim przekonaniu (jak stwierdziłem powyżej) osiągnięcie przedstawione w autoreferacie i oparte na wynikach zawartych w zbiorze publikacji przedkładane do oceny w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego stanowi istotny wkład w tematykę uprawianą przez Habilitantkę; oceniam je pozytywnie i wnoszę o dopuszczenie dr Magdaleny Zimnickiej do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Uważam tym samym, że spełnione są wymogi Ustawy Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce z dnia 20 lipca 2018 r wraz z późniejszymi zmianami.

*Maciej Gajda*