



**POLITECHNIKA
GDAŃSKA**

WYDZIAŁ CHEMICZNY

Prof. dr hab. inż. Jarosław Chojnacki,
Katedra Chemii Nieorganicznej,
Wydział Chemiczny PG

Gdańsk, 22.01.2020 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej p.t.
„DWUSKŁADNIKOWE KRYSTALICZNE
KOMPLEKSY MOLEKULARNE WYBRANYCH POCHODNYCH BENZOFURANU”
mgr Ilony Barbary Materek

Ocena formalna

W związku z otwartym postępowaniem doktorskim Pani mgr Ilony Barbary Materek, z Instytutu Nauk Chemicznych Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, otrzymałem do recenzji komplet wymaganych dokumentów, zgodny z Rozporządzeniem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego Dz.U z dnia 30 sierpnia 2018 r., poz. 1669.

Manuskrypt rozprawy doktorskiej zawiera 260 numerowanych stron i ma układ dość typowy dla tego typu prac. Część literaturowa obejmuje 30 stron, a część eksperymentalna to kolejne 100 stron. Opis literatury badanego zagadnienia jest wyważony i skoncentrowany na zagadnieniach związanych z tematem doktoratu i zawiera 167 pozycji literaturowych. Cel pracy został sformułowany na początku części eksperymentalnej, po czym następuje opis metodyki stosowanych badań, po czym Autorka przechodzi do opisu wyników badań syntetycznych i strukturalnych. Część ta zakończona jest podsumowaniem i wnioskami oraz spisem cytowanej literatury.

Dodatkowo rozprawa zawiera okazały suplement o objętości 130 stron z rozdziałami od [S1] do [S10], po którym znajdujemy spis osiągnięć naukowych Doktorantki. Dla ułatwienia wykonania recenzji mgr Materek przesłała mi komplet plików CIF zawierających dane krystalograficzne odnośnie nowo wyznaczonych 35 struktur. Zbiór dokumentów kończą, wymagane od strony formalnej, streszczenia pracy doktorskiej w języku polskim i angielskim (Art.13 punkt 6).

Celem tej recenzji jest ustalenie spełnienia kryteriów wymienionych w odpowiedniej Ustawie (Art. 13.1 stwierdza, że rozprawa doktorska „...powinna stanowić oryginalne rozwiązanie problemu naukowego...oraz wykazywać ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w danej dyscyplinie naukowej lub artystycznej oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej lub artystycznej”). Autorka jako formę przedstawienia pracy wybrała manuskrypt książki (monografii) stanowiącej rozprawę doktorską. Poniżej opisałem szczegółowo stopień spełnienia wymienionych kryteriów przez mgr Ilonę Barbarę Materek.

Ocena merytoryczna

Problem tworzenia krystalicznych kompleksów molekularnych w formie solwatów, ko-kryształów czy innych kryształów wieloskładnikowych należy do centralnych wątków badawczych współczesnej

rentgenowskiej analizie strukturalnej oraz stanowi ważny aspekt projektowania postaci leków. Jednym z powodów zainteresowania tym tematem jest możliwość modyfikacji właściwości fizykochemicznych postaci farmaceutycznych leku, zawierających tę samą substancję czynną (ten sam składnik aktywny farmaceutycznie, *active pharmaceutical ingredient*, API) aby uzyskać lepsze efekty terapeutyczne. Od dawna wiadomo, że substancje zarówno nieorganiczne jak i organiczne mogą tworzyć z rozpuszczalnikami wspólne fazy krystaliczne zwane solwatami. Oczywiście modyfikuje to właściwości fizykochemiczne fazy stałej w porównaniu z kryształami czystego związku, np. rozpuszczalność w wodzie, stabilność termiczną i chemiczną, czy biodostępność. Tę właściwość materiałów można z pożytkiem wykorzystać w farmacji, chociaż problemem może być zmiana składu przez powolne uwalnianie rozpuszczalnika z kryształów. Wytworzenie kryształów wieloskładnikowych, w których druga, współkrystalizująca substancja, w odróżnieniu od solwatów, jest ciałem stałym (czyli otrzymanie ko-kryształów) otwiera możliwości zaprojektowania i zastosowania nowych form leków o lepszych właściwościach farmakologicznych, korzystając z tych samych (zwykle dobrze przetestowanych) API. Dodatkowym motywem dla tych badań jest założenie, że tego typu nowe krystaliczne kompleksy molekularne będą zapewniały większą stabilność składnika aktywnego i będą łatwiejsze w przechowywaniu od solwatów czy samych API. Listę dwunastu przypadków stosowania już obecnie leków w postaci ko-kryształów podaje Doktorantka w Suplemencie w rozdziale S2 (str. 143). Przedłużenie tej listy jest z pewnością bardzo ważnym celem badawczym.

Doktorantka, mgr Ilona Materek, w części literaturowej zawarła ogólny opis obecnego stanu wiedzy w zakresie inżynierii krystalicznej, chemii supramolekularnej, ko-kryształów w tym ko-kryształów farmaceutycznych i pokrótce omówiła aktywność biologiczną pochodnych benzofuranu podając w sumie 167 odnośników do współczesnej literatury oryginalnej. Zgodnie z obecnymi trendami Autorka podała również odnośniki *doi* dla większości prac. W mojej ocenie zarówno zakres tematyczny jak i stopień uszczegółowienia w tej części były dobrze dobrane w celu stopniowego wprowadzenia czytelnika w tematykę prowadzonych badań. Wykorzystując doświadczenie zdobyte przez promotor prof. dr hab. Annę Koziół i promotor pomocniczą dr Lilianę Mazur, Doktorantka zdecydowała się podjąć wyzwanie (zadanie) zbadania możliwości tworzenia ko-kryształów przez zmodyfikowany benzofuran oraz etylobenzofuran, podstawione na atomie węgla C2 grupą pirydylową. Związki te, oznaczane jako BZF1 i BZF2, zostały zsyntezowane przez grupę prof. Marty Strugi z Uniwersytetu Warszawskiego, ale otrzymanie monokryształów i określenie ich budowy to już dzieło mgr Ilony Materek. Potwierdzenie budowy tych nowych związków i wyznaczenie struktury rentgenowskiej jest już pierwszym oryginalnym osiągnięciem Doktorantki. BZF1 i BZF2 są to substancje stałe, potencjalne farmakofory, a reszta pirydynowa, dzięki obecności akceptorowego atomu wodoru, zwiększa szansę na wytworzenie systemu wiązań wodorowych niezbędnego dla zapewnienia stabilności fazy krystalicznej. Po wykonaniu przeglądu bazy danych krystalograficznych CSD jako współkrystalizujące substancje (ko-formery) Doktorantka wybrała kwasy dikarboksylowe (8 sztuk) oraz związki z jedną grupą karboksylową (12 sztuk) w tym dostępne na rynku substancje lecznicze oraz cztery związki o charakterze kwasowym ale bez grup karboksylowych (sacharyna, kwas pirydino-3-sulfonowy, kwas barbiturowy i hydrochinon). Wybór obiektu badań jest uzasadniony, gdyż po pierwsze w bazie danych CSD można znaleźć 316 struktur zawierających nazwy „benzofuran” i „solvate”, ale nie ma ani jednej struktury zawierającej benzofuran (czy etylobenzofuran) podstawiony grupą pirydylową na atomie węgla C2. Z drugiej strony wyselekcjonowane ko-formery dają dużą szansę na pojawienie się stabilizujących oddziaływań międzycząsteczkowych w rodzaju wiązań wodorowych X-H...N(pirydynowy), X-H... π czy oddziaływań warstwowych π ... π . Ponieważ niektóre z substancji współkrystalizujących wykazują

aktywność biochemiczną, powstałe krystaliczne kompleksy molekularne mogą nadawać się do celów farmaceutycznych niezależnie od aktywności pirydylobenzofenonu.

Do otrzymywania krystalicznych kompleksów molekularnych Doktorantka przetestowała dwie metody: współkryształizację z rozpuszczalnikiem (ok. 100 prób) oraz mielenie mechanochemiczne z późniejszą izolacją ko-kryształów przez krystalizację z roztworu (ok. 200 prób). Ponieważ lepsze wyniki otrzymywała tym drugim sposobem, stał się on podstawą do dalszych eksperymentów.

Procedura okazała się skuteczna, bowiem dla pochodnej BZF1 otrzymano krystaliczne kompleksy molekularne z czternastoma ko-formerami a dla pochodnej BZF-2 aż z siedemnastoma spośród 24 testowanych ko-formerów.

Pierwsze, podstawowe badanie polegało na porównaniu dyfraktogramów proszkowych substratów z dyfraktogramami produktów otrzymanych przez mielenie mechanochemiczne i z dyfraktogramami otrzymanymi przez symulację w programie Mercury z danych monokrystalicznych, po rekrystalizacji. We wszystkich opisywanych przypadkach dyfraktogramy produktów różniły się od sumy dyfraktogramów substratów świadcząc o wytworzeniu nowej fazy krystalicznej. Dobrą zgodność obrazu dyfrakcyjnego surowego produktu syntezy z wysymulowanymi obrazami na podstawie dyfrakcji na monokryształach Doktorantka uzyskała dla sześciu pochodnych BZF1 i sześciu BZF2. Występujące w pozostałych przypadkach odstępstwa Autorka tłumaczy możliwością utworzenia początkowo faz metastabilnych, które nie występują już w produktach po rekrystalizacji.

Dwa rodzaje rekrystalizowanych ko-kryształów: BZF1-kwas heksadienowy oraz BZF2- kwas 4-hydroksycynamonowy okazały się niestabilne w niższych temperaturach i podlegały przemianie fazowej. Tym niemniej, w obu przypadkach udało się wyznaczyć struktury obu odmian polimorficznych: wysoko- i niskotemperaturowej.

Otrzymane nowe fazy krystaliczne można było podzielić na dwie zasadnicze grupy: soli (lub solwatu soli w jednym przypadku) oraz ko-kryształów bez przeniesienia protonu na pirydynowy atom azotu. Taki transfer protonu oznacza zmianę wiązania wodorowego z typu N...H-O na wiązanie z asystą ładunku elektrycznego (+)N-H...O(-).

Rozróżnienia soli od ko-kryształu Doktorantka dokonywała w oparciu o szereg niezależnych metod. Pierwsza to analiza kąta C-N-C w reszcie pirydynowej BZF, druga to analiza geometrii grupy karbonylowej ko-formera, trzecia to znajdowanie atomu wodoru w różnicowej mapie gęstości elektronowej. Wszystkie podejścia prowadziły do spójnych wniosków (po uwzględnieniu efektów dodatkowych w przypadku BZF1malac i BZF2asac, co dobrze ilustruje Rys. 34). Podobne rezultaty Doktorantka otrzymała z analizy widm FTIR w zakresie podczerwieni (Rozdział 15 Części experimentalnej), w szczególności z położenia częstości drgań rozciągających grup C-O i C=O. Na tej podstawie można było podzielić otrzymane krystaliczne kompleksy molekularne na 9 typu soli i 24 typu ko-kryształu.

W dalszej części analizy danych strukturalnych Autorka poszukuje stałych, powtarzających się motywów strukturalnych, czyli syntonów. W obrębie ko-kryształów znalazła cztery takie syntony oparte o grafy: D , $R_2^2(7)$, (pojedynczy i podwojony) oraz bifurkacyjny motyw $R_1^2(6)$. Tabela 34 zawiera podsumowanie częstości występowania poszczególnych syntonów w ko-kryształach i ujawnia większą popularność motywów $R_2^2(7)$ i D . Motyw bifurkacyjny występował głównie dla pochodnych kwasu cyjankowego. W solach pojawiają się dodatkowe możliwości związane z utworzeniem silnych wiązań wodorowych -N(+)-H...O z asystą ładunku elektrycznego, co zwiększa liczbę obserwowanych motywów strukturalnych do sześciu, chociaż „nowe” motywy typu V, VI i VII są różne chemicznie, ale topologicznie identyczne, tzn. reprezentują stabilizowany ładunkiem bifurkacyjny

motyw $R_1^2(5)$. W przypadku soli rozłożenie typów motywów wiązań wodorowych jest bardziej równomierne (Tabela 35).

Geometria wewnętrzna kryształów jest dalej analizowana przez zbadanie wzajemnej orientacji płaszczyzn cząsteczka BZF / płaszczyzna grupy karboksylowej lub karboksylanowej w ko-formerze. Okazuje się, że koplanarne ułożenie BZF i grupy COOH lub COO- ko-formera sprzyja tworzeniu motywów cyklicznych $R_2^2(7)$. Dla soli preferowane było takie właśnie ułożenie koplanarne. Z kolei powstawanie motywów bifurkacyjnych $R_1^2(6)$ powodowało wzrost tego kąta. Podobnie przeanalizowano orientację płaszczyzn BZF w stosunku do płaskich cząsteczek ko-formerów, bądź ich części aromatycznej. Czasami orientacja tych płaszczyzn była bliska prostoadłej, np. dla kompleksów molekularnych ibuprofenu z BZF1 czy BZF2.

Asocjacja bezpośrednia poszczególnych cząsteczek w krystalicznym ciele stałym została skategoryzowana do typów: heterodimer, heterotrimer, tetramer lub heteroheksamer (jeden) z przewagą występowania tego drugiego w grupie faz ko-kryształów zawierających kwasy dikarboksylowe, hydrochinon lub ko-formery dwufunkcyjne. Powstawanie teramerów i heksameru można traktować jako dimeryzację motywów niższego rzędu, zapewniająca optymalne wykorzystanie wszystkich grup funkcyjnych.

Po tym fragmencie tekstu następuje analiza powierzchni Hirschfelda, wyliczonych zarówno dla cząsteczek BZF1 i BZF2 jak i dla ko-formerów występujących w kryszale. Dla każdej struktury sporządzono mapy oddziaływań (fingerprint) wraz z tabelą zawierającą procentowy udział poszczególnych kontaktów międzyatomowych (C...H, H...H, N...H itp.) w oddziaływaniach międzycząsteczkowych. Oprócz oddziaływań międzycząsteczkowych BZF...ko-former Doktorantka analizowała również oddziaływania między dwoma cząsteczkami ko-formera (lub droma anionami ko-formera dla soli).

Ostatnim elementem badania otrzymanych faz była analiza termogravimetryczna, umożliwiająca wyznaczenie temperatur topnienia i oszacowanie stabilności termicznej otrzymanych faz. Rozprawę kończy dwustronicowy rozdział Podsumowanie i wnioski.

Po przeczytaniu całości pracy stwierdzam, że wszystkie cele pracy zdefiniowane w punkcie 7 na stronie 71 zostały zrealizowane.

Doktorantka prawidłowo analizuje symetrię napotkaną w strukturach, starannie zwracając uwagę na liczbę cząsteczek zawartą w części symetrycznie niezależnej oraz na związane z tym położenie cząsteczek w pozycji ogólnej lub szczególnej. Poprawnie posługuje się również oznaczeniami motywów wiązań wodorowych w symbolice grafów i potrafi analizować oddziaływania międzycząsteczkowe przy wykorzystaniu powierzchni Hirshfelda.

Ciekawa jest stechiometria kompleksów molekularnych kwasów dikarboksylowych z BZF, w których zwykle nie dochodzi do przeniesienia protonów na resztę pirydyny (czyli tworzą się **ko-kryształy** o stechiometrii **2 BZF : 1 kwas**), natomiast związki **typu soli** mają stechiometrię **1:1** i powstają tylko w przypadku gdy wodorooanion tworzy silne wewnętrzne wiązanie wodorowe – anion wodoroszczawianowy, wodoromaleinianowy – co ułatwia jego powstanie (choć pewnie również utrudnia powstanie jonu dwuujemnego). Pochodne kwasów monokarboksylowych dawały fazy krystaliczne o spodziewanej stechiometrii 1:1 z wyjątkiem kryształów zawierających kwas cynamonowy, oraz 3,5-dihydroksybenzoesowy, które wykorzystywały dodatkowo grupę OH i tworzyły kompleksy molekularne wiążąc dwie cząsteczki BZF do jednej cząsteczki kwasu. W większości są to ko-kryształy z wyjątkiem kompleksów mocnych kwasów, a więc z grupą $-SO_2OH$

lub $-\text{SO}_2\text{NH}-$ czy kwasu orotowego i kwasu acetamido-2,4,6-trijodobenzoowego. Kompleks BZF2 z kwasem 4-aminosalicylowym jest specjalną solą, gdyż przeniesienie protonu jest połowiczne i tworzą się dwa jony zawierające dwukoordynowany atom wodoru: kation $[\text{BZF}\dots\text{H}\dots\text{BZF}]^+$ oraz anion $[\text{RCOO}\dots\text{H}\dots\text{OOCR}]^-$, oba położone na środkach symetrii.

Parametry bibliometryczne, aktywność naukowa, inne badania. Działalność w dziedzinie popularyzacji nauki oraz dydaktyczna

Wypełniając obowiązki recenzenta, oprócz analizy dostarczonych materiałów, przeprowadziłem niezależną ocenę całości aktywności naukowo-publikacyjnej mgr Ilony Materek przy użyciu bazy Web of Science. W przedziale czasowym 2012-2019 znalazłem w Jej dorobku 4 publikacje z listy JCR 3 z 2017 i jedna 2019), indeks Hirscha 3, liczba cytowań 16, co jest niezłym wynikiem zważywszy krótki okres czasu od opublikowania. Dane te są zgodne z tym, co przedstawiono w materiałach. Artykuły naukowe są zamieszczone w dobrych i bardzo dobrych czasopismach a sumaryczny współczynnik oddziaływania IF wynosi 13,895. Czasopismo „Biomedicine & Pharmacotherapy” należy do kwartyła Q1 w dziedzinie farmakologii i farmacji, a prestiżowe czasopismo „Crystal Growth & Design” należy do pierwszego kwartyła Q1 w Krystalografii i Nauce o materiałach (Materials Science). Jedynie czasopismo „Chemical Biology & Drug Design” zaliczane jest do kwartyła Q3, chociaż przypisano mu stosunkowo wysoki IF = 2,256 w dziedzinie chemii. Dorobek publikacyjny jest więc formalnie dobry, odnosząc go do liczbowych wymagań dla kandydata na stopień doktora. Pewnym mankamentem jest jednak to, że żadna z tych prac nie opisuje struktur kryształów należących do tematyki pracy, tzn. struktur zawierających resztę benzofuranu (opisano tam pochodne tetrazolu, tiomocznika, hydrazonu i seseliny oraz alloksantoksyletyny). Można odnieść wrażenie, że Autorka bardziej dba o dobrą współpracę naukową i publikowanie cudzych wyników niż własnych, co można uznać za powód do niepokoju, ale w pewnym sensie potwierdza Jej kompetencje naukowe oraz (ustawowo wymaganą) samodzielność, skoro jest zapraszana przez inne zespoły do współpracy. Ponieważ jakość wyznaczonych w doktoracie struktur krystalicznych (33 kompleksy wieloskładnikowe + 2 BZF) jest zwykle dobra, można oczekiwać, że materiał zawarty w pracy doktorskiej zostanie również wkrótce opublikowany i to w dobrym czasopiśmie lub czasopismach, zwłaszcza że szczegółowa analiza zebranych danych została już przeprowadzona w ramach manuskryptu rozprawy.

Doktorantka bierze aktywny udział w propagowaniu swoich wyników badań, czego dowodem jest zaprezentowanie w latach 2014-2019 czternaście komunikatów naukowych na zjazdach krajowych, głównie na Konwersatorium Krystalograficznym we Wrocławiu (9 pozycji), które jest powszechnie uznanym forum spotkań polskich krystalografów. Do tego dochodzi zaprezentowanie wyników tematycznie związanych z obecną pracą dokorską na międzynarodowym sympozjum „4 European School Of Crystallography” w Warszawie w 2017.

W roku 2016 Ilona Materek uczestniczyła w dwumiesięcznym stażu na Uniwersytecie Cambridge pod opieką prof. Williama Jonesa (tytuł projektu: „Multicomponent crystals forms of pharmaceutical cocrystals”).

W roku 2015/16 zdobyła finansowanie z dotacji celowej na realizację projektu naukowego na rodzimym UMCS (badania strukturalne pochodnych kumaryny). Do osiągnięć dydaktycznych zaliczyć należy opiekę nad (i owocną współpracę z) Aleksandrą Gotner, zdobywczynią 1 miejsca w II Ogólnopolskiej Olimpiadzie Krystalograficznej w 2016 roku.

Z obowiązku recenzenta dodam, że znalazłem bardzo nieliczne błędy literowe, które nie umniejszają mojej wysokiej oceny jakości opisów.

(oznaczenia X^Y i X_Z oznaczają odpowiednio: strona X, wiersz Y od góry lub strona X wiersz Z od dołu)

37¹⁰ jest: BFZ·ko-former, powinno być: BZF·ko-former,

Motyw III i IX powinny mieć przypisane oznaczenie D (discret), które na rysunkach 35 i 36 nie wiadomo dlaczego zostały pominięte.

Suplement, 141₁ błędna data przyznania nagrody Nobla, jest: 2004, powinno być: 2016.

Do silnych punktów rozprawy mgr I. Matek należy fakt, że praca napisana jest niezwykle starannie i zawiera najmniejszą liczbę błędów wśród dotychczas recenzowanych przeze mnie rozpraw doktorskich.

Zagadnienia, pytania do wyjaśnienia:

1. Do jakiej kategorii, w świetle podanych definicji, zaliczyć można strukturę BZF1oxac, zawierającą od strony chemicznej trzy składniki?
2. Struktura BZF2asac, która na str. 56, 77, 80, 88, 89, 90, 93 została uznana za sól, potem nie występuje od str. 96 w tabelach dla soli (ani w tabelach ko-kryształów), pominięto ją także w analizie powierzchni Hirshfelda i na końcu w podsumowaniu na str. 129 podano, że było 8 soli a nie 9, pomijając BZF2asac. Dlaczego?
3. Dlaczego 19 z 33 struktur było wyznaczanych w temperaturze pokojowej 293K a reszta w 120K? Czy obserwowana zgodność obrazu dyfrakcyjnego proszkowego i wysymulowanego z monokryształów zależy od temperatury wyznaczania struktury monokryształu?
4. Czy poszukiwano oddziaływań halogenowych w fazie zawierającej atomy jodu, BZF2acetr?
5. Jak wyglądały dyfraktogramy proszkowe produktów mielenia mechanochemicznego, dla których nie uzyskano monokryształów po rekrytalizacji? W rozprawie ich nie zamieszczono i nie opisano ich wyglądu.
6. Proszę wyjaśnić naturę „sił hydrofobowych”, składających się na: „oddziaływania hydrofobowe typu π - π ” (tytuł rozdziału 13)?
7. Czy klasyczne określenia API i ko-former nie powinny być zamienione w przypadku kompleksów molekularnych benzofenonu z ibuprofenem, naproksenem czy kwasem barbiturowym? Jakże to może mieć znaczenie praktyczne?

Uwagi końcowe, podsumowanie

Przedstawiony mi do recenzji autoreferat reprezentuje wysoki poziom naukowy oraz edytorski i zawiera kompetentny i wielostronny opis struktur otrzymanych w czasie przygotowywania rozprawy doktorskiej oraz ich podstawową charakterystykę fizykochemiczną. Stwierdzam, że Doktorantka potrafi prowadzić badania naukowe w zakresie krytalografii, inżynierii kryształu i krytalochemii farmacyjnej. Opracowanie tematu podjętego przez Doktorantkę stanowi oryginalny wkład w badania fizykochemiczne oraz strukturalne krytalicznych kompleksów molekularnych o potencjalnym znaczeniu farmaceutycznym, gdyż krytaliczne pochodne pirydylobenzofuranów do tej pory nie były znane a zastosowanie metod syntezy mechanochemicznej rozwiązuje wiele problemów występujących podczas klasycznej współkrytalizacji z roztworu. Magister Ilona Matek zgromadziła wartościowy dorobek naukowy, który, oprócz badań opisanych w niniejszym doktoracie, obejmuje również współpracę z innymi uczonymi, udokumentowaną publikacjami, co potwierdza jej samodzielność jako badacza i stanowi zewnętrzne uznanie jej kompetencji. Z lektury przedstawionej rozprawy doktorskiej wynika, że Kandydatka dysponuje zarówno wiedzą ogólną w dziedzinie nauk

ściślych i przyrodniczych (świadczy o tym część literaturowa) jak i szczegółową wiedzą krystalochemiczną oraz umiejętnościami zaprojektowania i wykonania projektu badawczego z wykorzystaniem wielu współczesnych technik eksperymentalnych: rentgenowska analiza strukturalna proszkowa i monokrystaliczna, mechanochemia, spektroskopia IR czy analiza termiczna (zawarte w części eksperymentalnej) oraz obliczeniowo-teoretycznych: analiza topologiczna motywów wiązań wodorowych i analiza powierzchni Hirshfelda. Co ważniejsze potrafi doskonale zinterpretować wyniki tych badań i wyciągnąć wnioski oraz uogólnienia dotyczące dużego materiału eksperymentalnego. Doktorantka wykazuje również aktywność w popularyzowaniu wiedzy poprzez udział w konferencjach i pracę dydaktyczną, co stanowi ważny element uzupełniający charakterystykę Kandydatki.

W związku z powyższym stwierdzam, że Pani Magister Iona Barbara Materek spełnia ustawowe (Ustawa z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, przepisy wprowadzające: Rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 26 września 2016, Dz.U. z dnia 30 września 2016, art. 13 ust. 1 ustawy) wymagania stawiane kandydatom podczas ubiegania się o stopień doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie – chemia. Wnoszę więc do Rady Instytutu Nauk Chemicznych Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie o dopuszczenie Jej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Z wyrazami szacunku

Jarosław Chojnacki

