

O C E N A**rozprawy habilitacyjnej dr Agnieszki Kąckiej – Zych zatytułowanej
„Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów nitronowych”
oraz dorobku naukowego**

Przedłożona do oceny rozprawa habilitacyjna jest formalnie pakietem czternastu publikacji opublikowanych w okresie lat 2019 - 2024 opatrzonych komentarzem przedstawiających dokonania w nich zawarte. Komentarz jest bardzo szczegółowy i precyzyjnie omawia zagadnienia zawarte we wspomnianych pracach. Spośród przedstawionego cyklu dokonań przedstawionych we wniosku, pięć z nich to publikacje monoautorskie, a w pozostałych dr Agnieszka Kącka-Zych jest autorem korespondencyjnym. Konstatacja tego faktu wymaga jak się wydaje komentarza. Trudno sobie dzisiaj wyobrazić wykonanie dobrej pracy w zakresie chemii organicznej wzbogaconej o badania fizykochemiczne, jako dokonania jedynie monoautorskie. Wskazanie udziału w publikacjach wieloautorskich na poziomie 25-70 procent uważam za rzetelne. Warto dodać, że w publikacjach wspólnych często jedynym współautorem jest profesor Radomir Jasiński, z którym dr Agnieszka Kącka – Zych współpracuje od czasu wykonania pracy magisterskiej a później rozprawy doktorskiej.

Temat rozprawy, a właściwie tematyka zapisana w tytule wniosku to po prostu klamra spinająca prace dotyczące zrozumienia mechanizmów reakcji otrzymywania oraz badań właściwości kwasów nitronowych i ich estrów. Dotyczy to przede wszystkim reakcji heterocyklicznej cykloaddycji, gdzie reagentami są pochodne kwasów nitronowych oraz alkeny (izobuten, metylenocyklopentan, pochodne morfoliny, etc) Autorka znakomicie posługuje się warsztatem fizykochemika organika, zwłaszcza w zakresie metod numerycznych. Ten aspekt jest w oczywisty sposób dominujący. Umożliwia modelowanie przebiegu reakcji, wyciągnięcie wniosków dotyczących struktur stanów

Prof. Henryk Koroniak

Uniwersytetu Poznańskiego 8, Collegium Chemicum, 61-614 Poznań

NIP 777 00 06 350, REGON 00001293

koroniak@amu.edu.pl

www.chemia.amu.edu.pl

przejściowych/produktów pośrednich co w konsekwencji pozwala na proponowanie i zrozumienie mechanizmu reakcji.

Wszystkie prace przedstawione we wniosku habilitacyjnym zostały wydrukowane w dobrych czasopismach fachowych z zakresu modelowania molekularnego, badań strukturalnych i numerycznych. Dla formalności przytoczę, że publikacje te zostały opublikowane w *Journal of Molecular Graphics and Modelling* (3 prace), *Molecules* (3 prace), *Journal of Computational Chemistry* (2 prace), *Journal of Molecular Structure* (2 prace), *New Journal of Chemistry*, *International Journal of Quantum Chemistry*, *Journal of Cleaner Production*, *Theoretical Chemistry Accounts* (po jednej pracy).

Całkowity dorobek publikacyjny Habilitantki to 39 publikacji, kilkanaście wystąpień na konferencjach naukowych. W dokumentacji przytoczono, że sumaryczny IF przedstawionych do oceny publikacji przekracza 88 (oczywiście dotyczy to całego dorobku, gdyż sumaryczny IF przedłożonych we wniosku habilitacyjnym czternastu publikacji to około 52;).

Przeszukanie baz danych *SCOPUS* i *Web of Knowledge* jak i *ORCID* w chwili opracowywania niniejszej recenzji daje „lepsze” parametry scientometryczne niż te zawarte we wniosku, a mianowicie: liczba publikacji 39, liczba cytowań to 611 a indeks H jest równy 16. Ogólnie muszę stwierdzić, że parametry scientometryczne dla badań z zakresu fizykochemii organicznej jest to wynik bardzo dobry.

Nie jestem bezkrytycznym entuzjastą tzw. parametrów scientometrycznych, a w tym zwłaszcza *Sumarycznego IF* przedstawionych publikacji, chociażby z powodu podpisanej kilka lat temu przez wiele autorytetów i agend naukowych na świecie (w tym także przez Fundację na Rzecz Nauki Polskiej) *San Francisco Declaration* (<http://am.ascb.org/dora/>), która jednoznacznie stwierdza, że parametr ten (czyli *Impact Factor*, *IF*) w żadnym przypadku nie może być kryterium oceny kandydata, a jedynie może służyć do oceny „poczytności” periodyku, informacji ważnej dla wydawcy z powodów komercyjnych. Napisałem ten akapit już wcześniej przy okazji opracowywania innych recenzji, ale i tutaj jest on jak najbardziej na miejscu. Zwłaszcza dzisiaj, gdy obserwujemy wyjątkowe perfidne metody multiplikowania dokonań naukowych graniczące jednoznacznie z oszustwem, ale od tego nauka nie będzie lepsza (patrz, [Nobelium Bilalski, a Gdansk papermiller – For Better Science](#)). Z tego powodu warto oceniać dorobek nie uciekając się jedynie do danych scientometrycznych.

Dzisiaj w analizowanym przypadku oceny wniosku habilitacyjnego i dorobku dr Agnieszko Kąckiej – Zych można skonstatować zupełnie inne aspekty oceny. Dokonania

naukowe przedstawione jako wniosek habilitacyjny to efekt pracy w ciągu ostatnich 6 lat. Są to prace wykonane już po obronie doktoratu, który co także warto zauważyć, był inspiracją tematyczną dalszych badań, które zaowocowały dorobkiem przedstawionym jako rozprawa habilitacyjna. Nie ma wątpliwości, że dokonania te są wartościowe i pragnę już w tym momencie stwierdzić, że w moim przekonaniu wniosek spełnia wymogi stawiane rozprawom habilitacyjnym, zawarte w *Ustawie*, co oznacza, że będę w końcowym akapicie wniosku o nadanie Kandydatce stopnia doktora habilitowanego.

Sylwetka naukowa Kandydatki

Karierę naukową dr Agnieszki Kąckiej – Zych formalnie rozpoczyna praca magisterska (2014), a następnie doktorat uzyskany w roku 2018 na Politechnice Krakowskiej (promotorem w obu przypadkach był Profesor Radomir Jasiński). Praca doktorska dotyczyła teoretycznych studiów mechanizmów eliminacji kwasów karboksylowych z estrów nitroalkoholi. Warto dodać, że doktorat dr Agnieszki Kąckiej – Zych został wyróżniony nagrodą w konkursie ACK CYFRONET AGH na najlepszą pracę doktorską 2018 r. w obszarze szeroko rozumianych nauk obliczeniowych. Jak napisano w uzasadnieniu „Prace naukowe laureatki mają przełomowe znaczenie dla właściwego zrozumienia mechanizmu dekompozycji estrów kwasów karboksylowych. To kluczowy mechanizm m.in. dla opracowywania nowej generacji leków antynowotworowych”. Nie dziwi więc, że tematyka doktoratu jest kontynuowana w latach późniejszych (patrz publikacja H 11)

Uważam, że doktorat stanowił ważny krok w zdobyciu doświadczenia w zakresie stosowania metod numerycznych w chemii organicznej. Od tego momentu (analizując pojawiające się publikacje) metody numeryczne stanowią podstawowy nurt badań Habilitantki, wspierającej się syntezą jedynie w określonym zakresie.

Niewątpliwie znaczący wpływ na rozwój kariery naukowej dr Agnieszki Kąckiej – Zych miały odbyte w latach 2016 i 2019 krótkie staże naukowe. Mimo, że sumarycznie były to okresy tylko kilkutygodniowe, efekt tej współpracy jest bardzo dobry. Są to bowiem trzy „dobre” wspólne publikacje z prof. Luisem Domingo i Profesorem M. Rios-Gutierrezem. Podobny wymiar ma współpraca z Universidad Andreas Bello, Chile, gdzie efektem są dwie publikacje i prezentacja konferencyjna. Na uwagę zasługuje podobny schemat współpracy z ośrodkami polskimi (Instytut Ciężkiej Syntezy Organicznej, Blachownia, dr Ewa Dresler; Uniwersytet Marii Skłodowskiej Curie, dr Barbara Mirosław; Katolicki Uniwersytet Lubelski, prof. Oleh Demchuk). We wszystkich przypadkach efektem są wspólne publikacje

i wystąpienia konferencyjne, gdzie jak warto zauważyć, wkładem dr Agnieszki Kąckiej Zych jest wzbogacenie materiału o badania numeryczne. Taka współpraca dowodzi umiejętności symbiotycznej współpracy z innymi grupami badawczymi.

Ocena wniosku habilitacyjnego

Z przedstawionego powyżej skrótowo życiorysu naukowego, Kandydatka wybrała do wniosku habilitacyjnego prace badawcze dotyczące głównie heterocyklicznej cykloaddycji z użyciem pochodnych kwasów nitronowych, które spięte zostały wspólnym dość ogólnym tytułem rozprawy.

Precyzyjne określenie metodami numerycznymi parametrów energetycznych reakcji, w tym energii swobodnej Gibbsa, dla sugerowanych indywiduów molekularnych reakcji chemicznej (głównie stanów przejściowych i produktów pośrednich), określenie gęstości elektronowych w obrębie takich indywiduów, w konsekwencji umożliwia zbudowanie schematu przemian jak i zaproponowanie ścieżek reakcji. Umożliwia to z dużym prawdopodobieństwem zaproponowanie mechanizmu reakcji, a jedynym wyznacznikiem prawdziwości stawianych hipotez jest rzetelność i wiarygodność wykorzystanych metod numerycznych. Prócz tego – co jest oczywiste – ostatecznym testem zgodności teorii z praktyką jest wynik eksperymentu. Jako chemik - organik, nie jestem ekspertem w zakresie oceny rzetelności metod numerycznych (co zapewne dokonają inni recenzenci), chociaż uważam że jest to znakomite narzędzie wspomagające prace eksperymentalne.

Załączona dokumentacja dowodzi, że Habilitantka posiada duże doświadczenie w zastosowaniach metodologii obliczeń numerycznych do opisu i zrozumienia licznych przemian chemicznych. We wniosku habilitacyjnym skupia się głównie na rodzinie kwasów nitronowych i ich estrów.

W Autoreferacie Habilitantka przedstawia wyjątkowo szczegółowy opis swoich dokonań. Są to:

- Badania reaktywności kwasów nitronowych w zależności od obecności w strukturze cząsteczki grup elektronodonorowych lub elektronoakceptorowych. (H1).
- Pokazanie, że powstawanie siedmioczłonowych nitronatów w reakcji E-2-arylo-1-cyjanonitroetenu z Z-C-arylo-N-metylonitronem przebiega przez zwitterjonowy produkt pośredni, co wykazano metodami obliczeniowymi (H4).
- Opis kwantowochemiczny reakcji hetero Dielsa Aldera dla reakcji E-2-arylo-1-cyjanonitroetenów z izobutenem (H3) oraz z metylenocyklopentanem (H2).

- Teoretyczne studia heterocyklicznej cykloaddycji Dielsa Aldera z udziałem trifluoro-3-nitrobut-2-enu z 3,3-dimetylo-2-morfolinobutenem jako dienofilem (H9). W tym przypadku szczególnie istotne było wykazanie obserwowanej regio- i stereoselektywności.
- Omówienie reakcji cykloaddycji halogenonitroalkenów z karbenami (H8). Reakcja ta opisana wcześniej przez innych autorów doczekała się kwantowochemicznej analizy uzasadniającej powstanie obserwowanych produktów, w tym układu trójczołowego po addycji karbenu do wiązania C=C.
- Reakcja difenyldiazometanu z trichloro-1-nitroprop-1-enem: wyjaśnienie regiochemii reakcji jak i przemiany pierwotnego produktu do trwalszego nitronatu (H11)
- Eliminacja grupy bromotrimetylosilanu z 2-(trimetylosililoksy)-3-bromo-3-metyloizolsazoliny. (H14)
- Czteroczłonowe nitronaty ze sprzężonych nitroalkanów omówienie reakcji elektrocyklizacji jak i kwantowochemiczne dowody na mechanizm cyklizacji. (H5)
- Konwersja N-trialkilosililoksynitronatów do izoksazolin (H6) z eliminacją trimetylosilanolu.

Tematyka badawcza, którą zajmuje się Kandydatka mieści się w ramach szeroko pojmowanych badań z zakresu fizykochemii organicznej. Mimo deklarowanej dość często pracy eksperymentalnej, uważam że podstawowym nurtem badań jest zrozumienie mechanizmu zachodzących reakcji, który determinuje (i wyjaśnia) bardzo precyzyjna analiza parametrów energetycznych reakcji uzyskana metodami numerycznymi.

Przedstawione powyżej skrótowe streszczenie dokonań Habilitantki w moim przekonaniu jednoznacznie dowodzą, że dr Agnieszka Kącka – Zych jest aktywnym i doświadczonym badaczem, która potrafi znany sobie warsztat modelowania molekularnego wykorzystać do zrozumienia i wyjaśnienia różnorodnych mechanizmów reakcji.

Charakterystyka i ocena dokonań naukowych dr Agnieszki Kąckiej Zych jest jednoznacznie pozytywna; Podobnie ocena jej dokonań poza-badawczych, zwłaszcza w zakresie działania na polu kształcenia i dydaktyki jest równie pozytywna.

Habilitantka jest zaangażowana w proces dydaktyczny realizowany na macierzystej uczelni – Politechnice Krakowskiej, zwłaszcza w realizacji zajęć z zakresu chemii organicznej; między innymi od roku 2021 jest kierownikiem modułu Chemia Organiczna.

Jak pokazano we wniosku, od roku 2020 była promotorem kilku (4) prac licencjackich i jednej magisterskiej z zakresu technologii chemicznej.

Nie powinno ująć naszej uwadze, że Habilitantka jest opiekunem studenckiego Koła Naukowego Chemików na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej. W sposób dość oczywisty ta aktywność przenosi się na popularyzację nauki, oczywiście w zakresie chemii. Organizowała warsztaty dla młodzieży finansowane z różnych źródeł zewnętrznych.

Nie była beneficjentem „dużego” grantu, jednakże jak wynika z dokumentacji potrafiła współpracować z różnymi grupami badawczymi, a także indywidualnie uzyskiwać wsparcie chociażby na obliczenia komputerowe.

Podsumowując stwierdzam, że przedstawiona do oceny rozprawa habilitacyjna Pani dr Agnieszki Kąckiej – Zych spełnia wymogi ustawy z dnia 13 stycznia 2023 r. o zmianie ustawy – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce oraz niektórych innych ustaw (Dz. U. z 2023 r. poz. 212) oraz zasługuje na moją pozytywną ocenę. Upoważnia mnie to do sformułowania wniosku o realizację dalszych etapów procedury nadania Kandydatce stopnia doktora habilitowanego w zakresie chemii.



Prof. dr hab. Henryk Kozłowski

Poznań 26 stycznia 2025 roku