



Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni
im. Jerzego Habera
Polskiej Akademii Nauk



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Kraków, 20 stycznia 2025

Prof. dr hab. Maciej Szaleniec
Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni
im. Jerzego Habera
Polskiej Akademii Nauk
maciej.szaleniec@ikifp.edu.pl

**Recenzja pracy habilitacyjnej dr inż. Agnieszki Barbary Kąckiej-Zych pt.
„Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów nitronowych”**

Wstęp

Recenzja pracy habilitacyjnej **dr inż. Agnieszki Barbary Kąckiej-Zych** pt. **„Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów nitronowych”** jest wykonywana w oparciu o przepisy zawarte w rozdziale 3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2023 r. poz 742). Według przedstawionego przez habilitanta autoreferatu, kandydatka nie ubiegała się wcześniej o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Przebieg pracy naukowo-zawodowej

Pani dr inż. Agnieszka Kącka-Zych, wg. własnego rekordu z bazy ORCID, od początku swojej kariery była związana z Wydziałem Technologii i Inżynierii Chemicznej na Politechnice Krakowskiej, gdzie ukończyła studia magisterskie (10.2014) i doktorskie (04.2018), a następnie podjęła pracę na stanowisku asystenta (od 10.2017 do chwili obecnej). Przed uzyskaniem doktoratu odbywała krótkie staże naukowe w Universidad de Valencia (tydzień w 2016 i 2019) oraz staże studenckie (na własnej uczelni oraz na Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie), a po doktoracie odbyła 3 tygodniowy staż w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN (2019), około 20 dniowy w Universidad de Valencia (2019) i podobnie 2 tygodniowy w Universidad Andrés Bello w Chile. Kluczową do oceny aplikacji habilitacyjnej jest współpraca z profesorami Luisem Domingo i Mar Rios- Gutiérrezem z Uniwersytetu w Walencji. Profesor Domingo jest autorem Molecular Electron Density Theory, którą habilitantka stosuje w swoich badaniach. Pani dr inż. Kącka-Zych posiada kilka publikacji i wystąpień konferencyjnych, gdzie prof. L. Domingo jest współautorem, tak więc **nie ma wątpliwości**, że jej dwa krótkie staże zaowocowały **istotną** działalnością naukową. Zasadniczo cały cykl habilitacyjny wydaje się być pod silnym wpływem i inspiracją tej współpracy, chociaż należy podkreślić, że hiszpańscy współpracownicy nie są współautorami tego cyklu. Drugą istotną współpracę habilitantka nawiązała z grupą prof. Patrycją Pérez, która zakończyła się opublikowaniem jednej publikacji i jednym wystąpieniem konferencyjnym. Habilitantka nawiązała również (zakładam, że zdalną) współpracę z prof. Dmytro Babyukiem z *Chernivtsi National University na Ukrainie* oraz z dr Ewą Dresler z Instytutu Ciężkich Syntezy „Blachownia”. W obu przypadkach habilitantka stosowała metodologię MEDT do opisu reakcji organicznych i powstały w wyniku współpracy publikacje i wystąpienia konferencyjne.



Chociaż więc habilitantka w swojej karierze nie może poszczycić się dłuższym stażem w czasie doktoratu czy w okresie podoktorskim, w mojej ocenie **jej działalność naukowa we współpracy z innymi jednostkami w połączeniu z kilkoma krótkimi stażami wypełnia wymogi ustawy.**

Informacje o osiągnięciu i dorobku habilitantki

Przedstawiona mi do recenzji praca habilitacyjna jest monotematycznym cyklem 14 publikacji opublikowanych w czasopismach z listy JCR. W przeważającej części cykl został opublikowany w czasopismach specjalistycznych, w tym o raczej pośredniej renomie. Wyjątkiem są prace, które ukazały się w J. Clean Prod (Q1, IF 11) oraz dwie prace w J. Comput. Chem. (Q1/Q2 IF 3). Pozostałe prace należą do drugiego kwartyła (6 prac, z czego dwie w Molecules wydawnictwa MDPI), trzeciego (4 prace) a nawet czwartego (jedna praca). Całkowity współczynnik IF cyklu wynosi 52 przy medianie IF o wartości 3.1. Habilitantka jest autorem korespondencyjnym we wszystkich pracach cyklu przy czym aż w 5 z nich jest jedynym autorem. Przedstawione udziały autorskie wg. oceny habilitantki są w zakresie 25-100%, przy czym te niższe wartości oszacowała habilitantka dla prac wieloautorskich. Udziały te są wiarygodne i poparte odpowiednimi oświadczeniami współautorów, które zamieszczono w dokumentacji. Brak jest natomiast w dokumentacji informacji o cytowalności dorobku habilitantki. Na podstawie bazy Scopus (28.12.2024) jej prace były cytowane 607 razy a indeks H wyniósł 16 co jest wartością bardzo dobrą biorąc pod uwagę krótką karierę naukową (6 lat od doktoratu). Parametry te są odrobinę skromniejsze, gdy wykluczy się autocytowania **wszystkich autorów** (252 cytowania, H=9). Prace z cyklu są cytowane od 10-30 razy co wskazuje, że zostały zauważone przez środowisko naukowe

Prace składające się na opis osiągnięcia naukowego przedstawiają badania o charakterze w przeważającym zakresie teoretycznym. Habilitantka prowadzi swoje badania wykorzystując głównie Teorię Molekularnej Gęstości Elektronowej opracowanej przez Luisa Domingo, która bazuje na topologicznej analizie Funkcji Lokalizacji Elektronów zaproponowanej przez Becke i Edgecombe'a oraz Teorii Ewolucji Wiązania powiązanej z teorią katastrof zaproponowanej przez Bernarda Silvi'ego i współpracowników do analizy procesów zachodzących w czasie reakcji chemicznej. Wszystkie te koncepcje bazują na wieloletnich badaniach interpretacji teorii DFT przez Richarda Badera i jego teorii AIM (Atoms in Molecule).

W dokumentacji brak informacji o otrzymaniu jakichkolwiek recenzowanych grantów badawczych, które habilitantka zdobyła na finansowanie badań, poza grantami na przyznanie czasu obliczeniowego w ramach PL-GRIDu oraz jednym projektem finansowanym ze środków macierzystej jednostki (projekt C-2/91/2018/DS). Jeśli chodzi o współpracę w ramach grantów badawczych innych grup, w dokumentacji habilitantka wspomniała tylko o udziale w projekcie ERANet-LAC/3/GreenMol/3/2019. O ile łatwo jest zrozumieć brak potrzeby występowania o granty badawcze w przypadku prowadzenia badań w przeważającej części teoretyczne (zwłaszcza, gdy obliczenia prowadzone są na superkomputerach ACK CYFRONET) o tyle zadziwia brak zaangażowania habilitantki w projekty grantowe innych naukowców. Brak uzyskanych zewnętrznych środków na badania z zewnętrznych agencji oceniam jako **zdecydowanie poniżej oczekiwań** dla osoby starającej się o habilitację, nawet w świetle istotnego niedofinansowania instytucji grantowych, jakie miało miejsce w ostatnich latach. Brak doświadczenia w zdobywaniu i kierowaniu projektem badawczym może utrudnić w przyszłości habilitantce budowę własnej grupy badawczej.



Informacje o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych i popularyzatorskich kandydatki.

Habilitantka prowadzi zajęcia dydaktyczne odpowiadające zatrudnieniu na stanowisku badawczo-dydaktycznym, w szczególności kieruje modułem „Chemia Organiczna” oraz prowadzi zajęcia laboratoryjne na pierwszym stopniu studiów „Inżynierii Chemicznej i Procesowej”, „Technologia Chemiczna” oraz „Biotechnologii”. Prowadziła również kurs powiązany z tematyką habilitacji („Chemia organiczna związków azotowych”) oraz zajęcia dla II stopnia (np. kurs o cieczach jonowych). Była opiekunem 4 prac inżynierskich oraz 1 pracy magisterskiej oraz opiekuje się Kołem Naukowym Chemików przy Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej PK., w szczególności wspomagając badania studentów prowadzone w ramach sekcji Chemii i Technologii Chemicznej, którą kieruje od 2019 roku. Czterokrotnie pełniła również rolę opiekuna praktyk dla uczniów z Krakowskiego Technikum Chemicznego.

Pani dr inż. Kącka-Zych prowadzi również aktywną działalność popularyzatorską, współrealizując 3 programy RPO i POWR ukierunkowane na organizację warsztatów popularyzujących eksperymenty i chemię.

Ocena jednotematycznego cyklu publikacyjnego zgłoszonego przez habilitantkę do postępowania habilitacyjnego

Habilitantka swój cykl jednotematyczny oparta o badania reaktywności estrów kwasów nitronowych. W kręgu jej szczególnego zainteresowania leżały przede wszystkim reakcje:

- [3+2] cykloaddycji
- wewnętrznego przegrupowania estrów kwasów nitronowych do nitronorbornenu
- [4+1] oraz [2+1] cykloaddycji halogenonitroalkenów
- eliminacji bromotrimetylosilanu z 2-(trimetylosilyloksy)-3-bromo-3-metylo-izoksazolidyny i N-trialkilosililoksynitronatów
- transformacji (cykloaddycji ze styrenem lub akrylonitrylem) N-tlenku 3-nitroizoksazolidyny do 1-aza-2,8-dioksobicyklo[3.3.0]oktanu i jego pochodnych
- γ -eliminacji HNO_2 z analogów estrów kwasów nitronowych

W recenzji nie będę wnikał w omówienie badań mechanizmów reakcji przeprowadzonych przez panią dr inż. Kącką-Zych. Postaram się natomiast syntetycznie opisać moją ocenę stosowanej przez nią metodologii. Zasadniczo habilitantka stosowała podobny schemat badawczy w większości prac, tj. przeprowadzała modelowanie mechanizmu (lub jego kilku wariantów) stosując obliczenia DFT w polaryzowalnym ośrodku modelującym rozpuszczalnik (PCM). Następnie po zlokalizowaniu stanów przejściowych przeprowadzała obliczenia gęstości elektronowej (wykorzystując analizę NPA) wzdłuż ścieżki wyznaczonej przez analizę IRC (dla wybranych geometrii) i poddawała analizie zmiany tej gęstości elektronowej (tj. na drodze pomiędzy stanami stacjonarnymi) z wykorzystaniem metodologii BET i ELF. Badania te były w niektórych pracach uzupełniane obliczeniami deskryptorów elektronowych, które określają globalną twardość, elektrofilowość czy nukleofilowość cząsteczki i pomagają w opisie reaktywności badanych układów. Należy podkreślić, że w niektórych pracach habilitantka prowadziła też badania eksperymentalne, w sposób komplementarny dopełniające obliczenia, co **oceniam bardzo pozytywnie**.

Stosowana metodologia pozwoliła habilitantce nie tylko porównać konkurencyjne mechanizmy i zaproponować bardziej prawdopodobne ścieżki na podstawie parametrów kinetycznych (wysokości barier energetycznych) i termodynamicznych (zmiany entalpii swobodnej reakcji) ale również śledzić przepływy gęstości elektronowej w trakcie przemieszczania się jąder atomowych w reakcji i interpretować te zmiany wykorzystując aparat pojęciowy teorii wiązań Lewisa, który jest jednym z podstawowych aparatów pojęciowych stosowanych do zrozumienia mechanizmów procesów chemicznych. Dzięki takiemu podejściu habilitantka uzyskała znacznie „głębsze zrozumienie” przyczyn obserwowanych zjawisk w reakcjach, takich jak regioselektywność czy nawet stereoselektywność reakcji (obserwowanej pomimo braku stosowania chiralnych katalizatorów). Dzięki topologicznej analizie gęstości elektronowej habilitantka była w stanie, w ramach badanych mechanizmów, zaproponować kolejność rozpadu i powstawania wiązań chemicznych, czynniki odpowiedzialne za reaktywność grup elektronów w reakcji (takich jak podstawniki akceptorowo/donorowe czy rodzaj stosowanego rozpuszczalnika) oraz typów faz i punktów krytycznych dla badanych reakcji. Należy podkreślić, że poziom wglądu w procesy chemiczne, jaki uzyskała habilitantka stosując metodologię MEDT **w mojej ocenie przewyższa** informacje uzyskiwane w większości aplikacyjnych prac modelujących procesy chemiczne. Jak już wspominałem wyżej, w nielicznych przypadkach badaniom teoretycznym towarzyszyły badania eksperymentalne, w których habilitantka przeprowadzała syntezę oraz fizykochemiczną i strukturalną charakterystykę otrzymanych produktów.

Jako chemik zajmujący się zarówno badaniami teoretycznymi i eksperymentalnymi **bardzo wysoko** oceniam stosowaną przez habilitantkę metodę analizy prowadzonych badań mechanistycznych. Stosowana przez nią metodologia pozwala na znacznie większy wgląd w proces reakcji, a przez to potencjalnie pozwala na przewidywanie czynników odpowiadających za taki a nie inny przebieg procesu. Po przeczytaniu zarówno prac jak i autoreferatu habilitantki jestem pewien, że stosowana przez nią metodologia mogłaby być przydatna w badaniach mechanistycznych każdego chemika teoretyka. Stąd **nie mam wątpliwości**, że przedstawiony mi do oceny cykl habilitacyjny **jest wartościowy** z punktu widzenia nauk chemicznych.

Mam jednak zastrzeżenia co do **sposobu przedstawienia „osiągnięcia”** habilitantki w autoreferacie. Przedstawiony w autoreferacie opis prac cyklu nie został opatrzony komentarzem podsumowującym osiągnięcie. Habilitantka nie dokonała też „syntezy” wybranych aspektów fizykochemii ani nie określiła ram swojego osiągnięcia na tle obecnej literatury światowej poza wspomnianą w częściach wstępnych prac „deeper” lub „comprehensive exploration”. Habilitantka nie zadbała również o wypunktowanie obszarów uprawianej przez nią dyscypliny naukowej, które jej osiągnięcie w sposób istotny rozwinęło. Chociaż nie mam wątpliwości, że cykl jest spójny tematycznie (dotycząc faktycznie reakcji i właściwości kwasów nitronowych oraz ich pochodnych), niezbyt szczęśliwie sformułowany tytuł oraz brak właśnie podsumowania autoreferatu pozostawia mnie w niepewności, co właściwie habilitantka uważa za swoje „osiągnięcie”. Zupełnie nie jest też dla mnie jasne, czy praca habilitantki ograniczała się wyłącznie do stosowania metodologii MEDT czy też częścią jej osiągnięcia jest rozwój tej metodologii (choćby przez eksplorację możliwości stosowalności metodyki). Dlatego w załączeniu do tej recenzji przesyłam cztery, blisko powiązane ze sobą pytania, które habilitantka powinna uwzględnić w czasie niezbędnego w mojej ocenie kolokwium habilitacyjnego. **W związku z tym, formalnie składam wnioszek o przeprowadzenie kolokwium w ramach postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego.**



Podsumowanie

Jak już wspominałem w powyższej części recenzji, brak syntezy opisanych wyników stanowi **poważny mankament** przedstawionej mi do oceny pracy habilitacyjnej. Moja ocena dorobku jest, jednakże **zdecydowanie pozytywna**, dlatego nawet pomimo braku syntetycznego podsumowania stwierdzam, że przedstawiony cykl wnosi „znaczący wkład w rozwój dyscypliny” nauk chemicznych w rozumieniu Ustawy „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” z dnia 20 lipca 2018 r. (Art. 219, pkt 2). Zaznaczam jednak, że wymagam aby habilitantka odniosła się do moich wątpliwości opisanych w recenzji w czasie kolokwium habilitacyjnego. Wnoszę do Komisja Uniwersytetu Łódzkiego do spraw stopni naukowych w dyscyplinie nauki chemicznych o dopuszczenie dr inż. Agnieszki Barbary Kąckiej-Zych do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego.

Prof. dr hab. Maciej Szaleniec