

Prof. dr hab. Stanisław Kucharski
Instytut Chemii
Uniwersytet Śląski
ul. Szkolna 9
40-006 Katowice

Katowice, 20 stycznia 2025

**Recenzja osiągnięcia naukowego dr Agnieszki Kąckiej-Zych
zatytułowanego „Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów
nitronowych”**

w związku z postępowaniem habilitacyjnym prowadzonym przez Wydział
Chemii Uniwersytetu Łódzkiego.

Dr Agnieszka Kącka-Zych ukończyła studia wyższe na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej, uzyskując tytuł inżyniera (rok 2013) oraz magistra inżyniera (2014). W roku 2018 uzyskała stopień doktora w dziedzinie *nauki chemiczne*, w dyscyplinie *chemia*, na podstawie przedłożonej Radzie Wydziału Inżynierii i Technologii Chemicznej rozprawy *”Teoretyczne studia nad mechanizmem eliminacji kwasów karboksylowych z estrów nitroalkoholi”* zrealizowanej pod kierunkiem prof. dr. hab. Radomira Jasińskiego. Od roku 2014 jest zatrudniona na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej, najpierw na stanowisku starszego referenta technicznego, potem asystenta naukowo-dydaktycznego, a od roku 2019 do chwili obecnej – na stanowisku adiunkta badawczo-dydaktycznego.

Dorobek naukowy dr Agnieszki Kąckiej-Zych zamyka się w trzydziestu ośmiu publikacjach (w tym dwie monografie o charakterze dydaktycznym), z których 25 ukazało się po doktoracie, o łącznym współczynniku wpływu IF=88,1.

Indeks Hirscha Habilitantki wynosi 14 (wg bazy *Web of Science*), a Jej prace były cytowane 455 razy (wg tej samej bazy). Habilitantka prezentowała wyniki swoich badań na 35 konferencjach naukowych, krajowych i zagranicznych. Na siedmiu z nich były to wystąpienia ustne, a na 28 – prezentacje posterowe. Wygłosiła także pięć wykładów na zaproszenie w krajowych instytucjach naukowych.

Habilitantka uczestniczyła w realizacji szeregu projektów badawczych: w wykazie osiągnięć zamieściła dwanaście odnośnych pozycji. Spośród dziewięciu grantów, w których pełniła funkcję kierownika, siedem to granty obliczeniowe, umożliwiające wykonanie obliczeń w Centrum Komputerowym w Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie. Pozostałe projekty, realizowane pod kierownictwem Habilitantki, to granty wewnętrzne finansowane ze środków własnych Wydziału. W wykazie osiągnięć wymieniono także kilka projektów, w których dr Kącka-Zych była wykonawczynią. Należy do nich projekt ERANet-LAC (finansowany przez Unię Europejską, rok 2020), OPUS, z roku 2013, finansowany przez NCN, oraz projekt MINECO, z roku 2016, finansowany przez Rząd Hiszpanii.

Habilitantka odbyła trzy staże zagraniczne: dwa w Uniwersytecie Walencji (Hiszpania), jeden w Uniwersytecie Andres Bello w Chile. Obydwa staże w Walencji trwały w sumie około trzech tygodni, pobyt w Chile – około dwóch tygodni. Jeżeli chodzi o uczelnie krajowe wspomnieć należy dwumiesięczny staż w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, oraz miesięczny pobyt w Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej.

Omawiając aktywność naukową Habilitantki, wynikającą z odbytych staży naukowych, należy zaznaczyć, że pomimo ich krótkoterminowego charakteru, rezultaty nawiązanej współpracy są znaczące. Staż w Uniwersytecie Walencji zaowocował trzema wspólnymi pracami i dwiema prezentacjami konferencyjnymi; wyjazd do Chile – jedną publikacją i jednym wystąpieniem na konferencji. Odnotowuję także wiele wspólnych prac wynikających ze współpracy z polskimi instytucjami naukowymi: UMCS – 15 pozycji (publikacje+wystąpienia konferencyjne), KUL – 11 pozycji, Instytut Ciężkiej Syntezy Organicznej "Blachownia" – 4 pozycje.

Habilitantka ma również doświadczenie w działalności recenzenckiej, m.in. była recenzentką kilku prac dyplomowych, a w latach 2018 – 2023 wykonała 60 recenzji publikacji naukowych, najczęściej dla *Molecules* (20) oraz *RSC Advances* (7).

Ocena osiągnięcia naukowego

Wyniki badań, będące treścią osiągnięcia naukowego, zamieszczono w czternastu publikacjach: pięciu monoautorskich, pięciu dwuautorowych, trzech sześćoautorowych oraz jednej siedmioautorowej. Habilitantka jest we wszystkich pracach autorem korespondującym. W odniesieniu do wszystkich publikacji, w których występuje więcej niż jeden autor, dołączono stosowne

oświadczenia współautorów. W publikacjach dwuautorowych udział Habilitantki przekracza 60%, natomiast w pracach wieloautorских zawiera się między 25% a 40%.

Prace, składające się na osiągnięcie naukowe, ukazały się w czasopismach indeksowanych w *Journal Citation Report*, w większości posiadających wysoki IF (8 prac z IF większym lub równym 3, w tym jedna w prestiżowym *J. Clean Prod.*, IF=11.1). Kilka prac zostało opublikowanych w uznanych czasopismach o profilu teoretyczno-kwantowym: *J. Comput. Chem.*, *Int. J. Quantum Chem.*, *Theor. Chem. Acc.*, *J. Mol. Struct.*.

Przedmiotem badań są, zgodnie z tytułem osiągnięcia, estry kwasów nitronowych. Większość prac poświęcono badaniom przebiegu reakcji cykloadycji, niektóre analizują możliwe struktury pochodnych kwasów nitronowych. Istotnym wyróżnikiem wykonanych badań są stosowane techniki badawcze. Autorka używa w swoich badaniach narzędzi teoretycznych, stworzonych na bazie gęstości elektronowych, zbiorczo oznaczanych jako MEDT (Molecular Electron Density Theory). Funkcję gęstości elektronowej, która jest podstawą analizy MEDT, wyznaczono na podstawie obliczeń metodą DFT (Teoria Funkcjonału Gęstości). Metoda MEDT, zaproponowana przez L.R. Domingo (pozycje 1,3,8,11 w spisie literatury w Autoreferacie), pozwala wygenerować na podstawie gęstości elektronowej nowe narzędzia teoretyczne, przydatne w opisie rozkładu elektronów w cząsteczce oraz zmian w strukturze elektronowej, zachodzących w trakcie reakcji chemicznej. Tymi narzędziami są, m.in., wskaźniki ELF (Electron Localization Function) oraz BET (Bonding Evolusion Theory).

W pracy H1 przedstawiono, na podstawie wskaźnika ELF, strukturę elektronową i stabilność pochodnych kwasu nitronowego zawierających podstawniki elektronodonorowe i/lub elektronoakceptorowe. Autorka wykazała, że w zależności od typu podstawnika cząsteczka kwasu nitronowego przyjmuje strukturę jonu obojnego lub monorodnika.

Treścią prac H2 i H3 było zbadanie mechanizmu reakcji pochodnych nitroetenów z metylenocyklopentanem (H2) i izobutenem (H3). Są to przykłady reakcji Dielsa Adlera (DA) angażujących heteroatomy (Hetero DA). W obu przypadkach analiza wskaźników reaktywności pozwoliła – na etapie teoretycznym – wyeliminować jedną z dwóch możliwych ścieżek reakcji. W obu przypadkach obliczeniom towarzyszyły prace eksperymentalne, a zrealizowane syntezy wykazały trafność przewidywań teoretycznych. Innym przykładem udanego połączenia prac doświadczalnych z obliczeniami jest praca H11, w której na drodze teoretycznej (MEDT) ustalono mechanizm cykloadycji

[3+2] fenyłowej pochodnej diazometanu z pochodną nitropropenu. Wskazany przez teorię mechanizm reakcji został potwierdzony na drodze eksperymentalnej. Ten sam typ cycloaddycji, tzn. 32CA, angażujący pięcioczłonowe nitronaty i monopodstawione pochodne etenu, został poddany analizie teoretycznej, poprzez wskaźniki ELF i BET, i równocześnie był obiektem badań eksperymentalnych (H12). Badania eksperymentalne potwierdzają jednoetapowy charakter reakcji wskazany przez teorię.

Inny typ cycloaddycji, oznaczony jako 43CA, prowadzący do utworzenia pierścienia siedmioczłonowego, został zbadany w pracy H4. Obliczenia wskaźnika BET pozwoliły na rozszyfrowanie mechanizmu reakcji.

W kolejnej pracy, H5, przebadano reakcję powstawania czteroczłonowych estrów kwasu nitronowego. Autorka ustaliła typ procesu jako jednoetapowy, wyznaczyła także wartość energii swobodnej Gibbsa.

Prace H6 i H7 stanowią kolejny przykład skuteczności obliczeń wywodzących się z molekularnej gęstości elektronowej: w pracy H6 opisano konwersję wybranych pochodnych estrów kwasów nitronowych w pochodne izoksanoliny, a w pracy H7 wykonano obliczenia dotyczące γ eliminacji grupy HNO₂ z analogów estrów kwasów nitronowych. W tym ostatnim przypadku autorzy wykazali, analizując kolejne fazy badanej reakcji, mechanizm jednoetapowy.

Monoautorska praca Habilitantki, H8, została poświęcona badaniu mechanizmu cycloaddycji prowadzącej do utworzenia pierścienia pięcioczłonowego (41CA). Reakcja jako taka opisana jest w literaturze, jednakże mechanizm molekularny został przedstawiony dopiero w pracy H8 na podstawie wskaźników MEDT. Tematem pracy H10 była reakcja cycloaddycji [3+2] estrów nitronowych z nitroetylenem. Spośród kilku możliwych ścieżek reakcji, obliczenia wskaźników typu MEDT pozwoliły na ustalenie jednej.

Praca H13 to studium, oparte na wskaźnikach MEDT, poświęcone przekształceniom wewnętrznych estrów kwasów nitronowych do nitronorbornów. W pracy H14 metody teoretyczne zastosowano do zbadania mechanizmu eliminacji grupy bromotrimetylosilanu z pochodnej izoksazoliny.

W podsumowaniu dotyczącym jakości badań naukowych stwierdzam, że wysoko oceniam osiągnięcia badawcze Habilitantki. Niewątpliwą zasługą Autorki jest to, że sięgnęła po właściwe narzędzia badawcze. Metoda DFT ma swoje słabe strony i nie zawsze dostarczane przez nią wyniki dają gwarancje wysokiej dokładności. Jednakże jej wykorzystanie w celu skonstruowania wskaźników typu ELF i BET (także innych nie omawianych w recenzji) ma sens i wnioski wysnute na ich podstawie prowadzą do pełniejszego zrozumienia natury procesów chemicznych. Obliczeń przeprowadzonych przez Habi-

litantke, żadną miarą nie można uznać za rutynowe. Badane struktury są niezwykle złożone, do tego dochodzi wybór właściwego funkcjonu. W wielu przypadkach obliczenia winny być poprzedzone optymalizacją geometrii, wszystko to sprawia, że wymagają one od użytkownika eksperckiej biegłości. W dodatku musi on się wykazać znakomitą znajomością chemii organicznej.

Ocena działalności badawczej Habilitantki niewłączonej do osiągnięcia naukowego

Działalność badawcza dr Agnieszki Kąckiej-Zych, niewłączona do osiągnięcia naukowego, zogniskowana jest na badaniach struktury związków organicznych i badaniach mechanizmów wybranych klas reakcji chemicznych. Habilitantka jest aktywna publikacyjnie, od roku 2019 do chwili złożenia wniosku o nadanie stopnia, opublikowała ponad 20 prac. Z reguły są to publikacje, które ukazały się w dobrych czasopismach, o podobnej randze jak te, w których zamieszczono prace składające się na recenzowane osiągnięcie naukowe.

Ocena działalności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzatorskiej

Dr Kącka-Zych jest zaangażowana w działalność dydaktyczną od chwili zatrudnienia na stanowisku asystenta naukowo-dydaktycznego (rok 2017). Większość prowadzonych zajęć związana jest z przedmiotem chemia organiczna. Na kierunku *Inżynieria Chemiczna i Procesowa* pełni funkcję kierownika modułu *Chemia Organiczna* i prowadzi tam zajęcia audytoryjne i laboratoryjne z chemii organicznej na I stopniu studiów. Habilitantka uczestniczy także w prowadzeniu zajęć laboratoryjnych z chemii organicznej na trzech innych kierunkach studiów, realizowanych na Wydziale: *Technologii Chemicznej*, *Biotechnologii* oraz *Inżynierii Biomedycznej*. Na macierzystym wydziale prowadzi także zajęcia na II stopniu studiów w ramach modułu *Ciecze jonowe*. W swoim dorobku ma także promotorstwo pięciu prac dyplomowych.

Do osiągnięć dydaktycznych należy także zaliczyć aktywne uczestnictwo w pracach studenckiego koła naukowego, czego rezultatem były wyróżniające się prace dyplomowe oraz szereg wspólnych ze studentami publikacji i wystąpień konferencyjnych. Od roku 2019 Habilitantka pełni funkcję opiekuna jednej z sekcji Koła Naukowego Chemików. Ważną formą aktywności dydaktycznej było pełnienie funkcji opiekuna praktyk dla studentów Politechniki

Krakowskiej (czterokrotnie) oraz nadzór nad praktykami uczniów Technikum Chemicznego nr 3 w Krakowie.

Omawiając działalność popularyzującą naukę należy podkreślić aktywność Habilitantki w organizowaniu warsztatów dla uczniów szkół ponadpodstawowych. Realizowane w ramach RPO (Regionalny Program Operacyjny) projekty miały na celu przedstawienie chemii jako ważnej, a przy tym fascynującej dziedziny wiedzy. Zorganizowano trzy sesje warsztatowe (od 2 do 4 dni), dwie w roku 2019 i jedną w roku 2021.

Habilitantka udziela się również w działaniach organizacyjnych, m.in. jest członkinią komitetów redakcyjnych czasopism, *Compounds* oraz *Chemistry*, jest jednym z trzech redaktorów naczelnych czasopisma *Current Chemistry Letters*, pełniła także funkcję redaktora gościnnego w czasopiśmie *Chemistry of heterocyclic compounds*.

Jak widać z powyższego zestawienia Habilitantka jest zaangażowana zarówno w działalność organizacyjną jak i dydaktyczną i ten aspekt Jej aktywności oceniam bardzo pozytywnie.

Podsumowanie

Wniosek dr Agnieszki Kąckiej-Zych spełnia formalne wymagania Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. W szczególności Kandydatka: i) posiada stopień doktora ii) nie ubiegała się wcześniej o nadanie stopnia doktora habilitowanego iii) przedstawiła cykl powiązanych tematycznie artykułów opublikowanych w czasopismach naukowych iiii) wykazała się aktywnością naukową realizowaną poza macierzystą uczelnią.

Wniosek nie budzi najmniejszych wątpliwości także od strony merytorycznej. Wyniki uzyskane przez dr Agnieszkę Kącką-Zych, w badaniach będących podstawą postępowania habilitacyjnego, stanowią oryginalny, twórczy i ważny wkład do chemii organicznej. Habilitantka jest ekspertką w zakresie badań z zastosowaniem metod chemii kwantowej,

Biorąc to pod uwagę oraz całość dorobku naukowego i dydaktycznego stwierdzam, że dr Agnieszka Kącka-Zych spełnia wymagania formalne i merytoryczne wynikające z *Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018 roku odnoszące się do prac habilitacyjnych, i w związku z tym, wnoszę o dopuszczenie dr Agnieszki Kąckiej-Zych do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Włodzisław Kucharski