



Prof. dr hab. inż. Karol Grela
Laboratorium Syntezy Metaloorganicznej
Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych
Wydział Chemii Uniwersytet Warszawski

Warszawa, 15.07.2022

*Ocena dorobku i osiągnięcia naukowego dr Anny Darii Kaczmarek-Kędziery
będących podstawą wniosku o nadanie Jej stopnia doktora habilitowanego*

Przedmiotem rozprawy habilitacyjnej dr Anny Darii Kaczmarek-Kędziery (Wydział Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu) jest cykl dwunastu publikacji, zebrany i przedstawiony do recenzji wraz z towarzyszącym Autoreferatem pt.: „*Projektowanie i teoretyczna charakterystyka barwników wykazujących wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie ładunku*”, poparty innymi stosownymi dokumentami.

Po zapoznaniu się z dostarczonymi mi materiałami, chciałem przedstawić opinię jak następuje:

Podstawowe informacje o Kandydatce

Z racji swojej edukacji akademickiej dr Anna Daria Kaczmarek-Kędziera jest związana geograficznie z Toruniem, osobowo z prof. A. Sadlejem, i tematycznie z chemią teoretyczną. W r. 2000 wykonała Licencjat z chemii, pt. „*Metodologia obliczeń w przybliżeniu Hartree-Focka-Roothaana*” (Promotor: prof. dr hab. A. J. Sadlej).

W 2001 r. przedstawiła pracę Magisterską, pt. „*3-Aminopropenotial — studium dynamiki wewnątrzcząsteczkowej*” (Promotor: prof. dr hab. A. J. Sadlej).

W roku 2005 Pani Anna Daria Kaczmarek-Kędziera obroniła w Wydziale Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu doktorat, przedstawiając pracę pt. „*Błąd superpozycji bazy w teorii oddziaływań międzymolekularnych*” (Promotor: po-nownie prof. dr hab. A. J. Sadlej. Recenzenci: prof. dr hab. G. Chałasiński i prof. dr hab. W. A. Sokalski).

Obecnie Pani Anna Daria Kaczmarek-Kędziera jest zatrudniona jako Adiunkt w Katedrze Chemii Materiałów, Adsorpcji i Katalizy w Wydziale Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu.

Co ważne (i oczekiwane w modelowej karierze naukowej) w latach 2007-2008 odbyła *Staż podoktorski* w Ruhr-Universität Bochum, w katedrze chemii teoretycznej (Lehrstuhl für Theoretische Chemie). Niewątpliwie ten 15 miesięczny wyjazd dał Kandydatce duże doświadczenie i zachęcił Ją do samodzielności. Do innych aktywności



zagranicznych Kandydatki należy zaliczyć pobyt w Universidade de Santiago de Compostela (lipiec 2009) oraz w Jackson State University, aż 5 pobyków: w sumie 2 lata i 4 miesiące w okresie 2001–2006. Wszystkie te wyjazdy przyniosły wymierne korzyści, tak Kandydatce, jak i oczywiście grupom Ją zapraszającym.

Oprócz powyższych, dr Anna Daria Kaczmarek-Kędziera może pochwalić się licznymi współpracami naukowymi, w tym z grupą badawczą dr. hab. Borysa Ośmiałowskiego z Katedry Chemii Organicznej Wydziału Chemii UMK, z dr. hab. Katarzyną Matczyszyn z Politechniki Wrocławskiej, z dr. hab. Piotrem Żuchowskim z Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK, i innymi.

Ocena aktywności naukowej (całkowitego dorobku) oraz informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę

Pani dr Anna Daria Kaczmarek-Kędziera opublikowała też szereg prac, które nie wchodzą w zakres niniejszego Osiągnięcia, ale są wartościowe. Są to, między innymi: cztery publikacje powstałe przed doktoratem, oraz aż trzydzieści dziewięć (39) innych prac opublikowanych po doktoracie (w różnych czasopismach, zazwyczaj z obszaru chemii fizycznej) oraz rozdział we współ-edytowanej (brawo!) monografii w wydawnictwie Springer: *Handbook of Computational Chemistry*, edytorzy: J. Leszczyński, A. Kaczmarek-Kędziera, M. G. Papadopoulos, H. Reis, A. J. Sadlej, M. Shukla, T. Puzyn (ukazały się już dwa wydania: 2012 i 2016).

Łączny współczynnik wpływu wszystkich publikacji Kandydatki w czasopismach naukowych to 196,6 (a liczba cytowań tych prac – bez autocytowań – to 1032). Tak zwany *indeks Hirscha* Kandydatki wynosi 17.

W dokumentacji wymieniono znaczną liczbę komunikatów i posterów na konferencjach (9 przed, oraz 53 po doktoracie). Życzę Kandydatce dalszej tak intensywnej aktywności konferencyjnej w latach przyszłych.

Należy także odnotować aktywny udział Wnioskodawczynie w zespołach eksperckich lub konkursowych, w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji, itd., których tu nie będę wymieniał. Co jest oczywiste dla tak intensywnie publikującej Badaczki, dr Anna Daria Kaczmarek-Kędziera pełni także funkcję recenzentki (*per review*) wielu manuskryptów wysyłanych publikacji w uznanych czasopismach międzynarodowych.

Co istotne, Kandydatka brała aktywny udział w realizacji grantów badawczych, w tym jako kierownik:

1. *Projektowanie i synteza materiałów porowatych na bazie biopolimerów i ich kompozytów z magnetytem jako potencjalnych sorbentów dla leków z grupy NLPZ*, 2015–2019, NCN OPUS 7, kierownik projektu
2. *Badania nad możliwościami wykorzystania barwników skwarynowych we współczesnej chemii materiałów*, 2013–2016, MNiSW Iuventus Plus, kierownik projektu,



Świadczy to moim zdaniem o tym, że Pani dr Anna Daria Kaczmarek-Kędziera w pełni potwierdziła swoją skuteczność w pozyskiwaniu funduszy na prowadzenie badań naukowych.

Dodatkowo, Kandydatka działała w projekcie międzynarodowym COST Action 18212 – *Molecular Dynamics in the GAS phase*, jako członek *Management Comitee* oraz *Working Group WG3*. Weszła też Ona w skład Zespołu Ekspertów NCN w panelu ST4 do oceny wniosków o finansowanie projektów badawczych złożonych w konkursach OPUS 10, PRELUDIUM 10, SONATA 10, w r. 2016.

Oprócz zdobywania środków finansowych, Kandydata wykazuje się oczekiwaną na uczelni publicznej *działalnością dydaktyczną*, np. *Chemia ogólna*, ćwiczenia rachunkowe dla studentów I roku kierunku Chemia kosmetyczna, *Chemia*, laboratorium dla studentów pierwszego roku kierunku Weterynaria, *Strukturalne podstawy aktywności substancji czynnych*, wykład i pracownia komputerowa dla studentów I roku dwuletnich uzupełniających studiów magisterskich kierunku Chemia medyczna, *Chemia leków*, laboratorium dla studentów III roku kierunku Chemia medyczna, *Metody chemii obliczeniowej*, wykład dla doktorantów, i dużo, dużo innych. Wiele z powyższych to *opracowane autorsko* przez dr Annę Darię Kaczmarek-Kędzię programy zajęć dydaktycznych.

Była *Promotorką* jednej pracy licencjackiej i jednej pracy magisterskiej, oraz pełniła (lub: nadal pełni) funkcję *promotora pomocniczego* dla dwu doktorantów. Prowadziła też *opiekę* nad studentami. Dr Anna Daria Kaczmarek-Kędziera była także, i jest nadal zaangażowana w liczne szkolenia, warsztaty i inne aktywności popularyzujące naukę (Toruńska Szkoła Chemii Obliczeniowej, itp.), których nie będę tu wymieniał.

Ocena osiągnięcia naukowego, będącego podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Przedmiotem rozprawy habilitacyjnej dr Anny Darii Kaczmarek-Kędziery jest monotematyczny cykl dwunastu publikacji, zebrany i przedstawiony do recenzji w postaci Autoreferatu pt.: „*Projektowanie i teoretyczna charakterystyka barwników wykazujących wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie ładunku*” (elegancko złożonego w systemie GNU/Latex).

Wszystkie przedstawione tu artykuły zostały opublikowane w uznanych w chemii teoretycznej czasopismach z listy *Journal Citation Reports*. W siedmiu spośród dwunastu prac Kandydatka jest *pierwszym autorem*, a w ośmiu pełni rolę *autora korespondencyjnego* (a jedna praca jest jednoautorska). Dziewięć z tych prac ukazało się w okresie ostatnich trzech lat, co świadczy o dynamicznym rozwoju naukowym i pracowitości dr Anny Darii Kaczmarek-Kędziery.

Sześć prac z cyklu to studia czysto obliczeniowe, natomiast pozostałe powstały w ścisłej współpracy z grupami eksperymentalnymi (co jest zrozumiałe i oczywiste). Analiza tych publikacji oraz deklarowanego udziału w każdej z nich wykazuje, że rola dr Anny Darii Kaczmarek-Kędziery w opisanych tam badaniach była kluczowa.

Należy zauważyć, że Prace H1-H12 nie są opisane w Autoreferacie chronologicznie, zgodnie z datami publikacji; za to odpowiadają logicznemu ciągowi rozumowania, w jakim powstawa-



ły pomysły na kolejne projekty. W mojej ocenie przedstawiony dorobek wyraźnie wskazuje na istotny udział Habilitantki w wyborze głównego celu badań, sposobu jego rozwiązania i prezentacji wyników.

Jeśli chodzi o dane statystyczne i scientometryczne, to sumaryczny IF tych 12 prac wynosi $\Sigma_{IF} = 44,934$, co daje średni IF/publikację = 3,74. Sumaryczna liczba cytowań tych prac to 56. Jak na tak trudną (i – przynajmniej – dość hermetyczną) dziedzinę jaka jest chemia teoretyczna są to bardzo dobre wyniki.

Recenzent (chemik organik, specjalizujący się w syntezie organicznej) święcie wierzy, że rola chemii organicznej jest z definicji służebna w stosunku do innych dziedzin nauki. Mamy bowiem za zadanie dostarczać narzędzi i metod do efektywnego otrzymywania wymaganych związków organicznych. Podobnie, chemia teoretyczna i obliczeniowa pozwala zrozumieć, i *a priori* przewidzieć właściwości cząsteczek – celów do późniejszej syntezy. Na przykład, wiele nadziei wiąże się obecnie z cząsteczkami o precyzyjnie zaplanowanych właściwościach foto-fizycznych, projektowanych i otrzymywanych pod kątem konkretnych zastosowań. W swojej pracy, dr Anna Daria Kaczmarek-Kędziera pomaga takie związki zaplanować. Dlatego Recenzent w pełni zgadza się z Habilitantką, że *„aby możliwe było efektywne racjonalne projektowanie barwników organicznych do wymaganych zastosowań, niezbędne jest z jednej strony praktyczne zweryfikowanie jakości posiadanych narzędzi badawczych w danym kontekście, a z drugiej – zebranie podstawowych wiadomości o rozważanych układach, ich oddziaływaniach i charakterystyce fotofizycznej”*.

Tak więc, celem prac zebranych w ramach niniejszej Habilitacji było określenie czynników *strukturalnych* i *elektronowych*, umożliwiających kontrolowane dostrajanie właściwości foto-fizycznych cząsteczek wykazujących wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie ładunku, a także ocena stosowalności aktualnych narzędzi chemii obliczeniowej w racjonalnym projektowaniu takich układów. Z tego powodu, podobnie jak Habilitantka, szczególnie cenię prace [H3], [H6]-[H7] i [H10]-[H12], ponieważ powstały one w ścisłej współpracy z zespołami chemików eksperymentalnych. Pokazuje to, że dzięki obliczeniom teoretycznym projektowanie cząsteczek o pożądanej charakterystyce (tutaj: fotofizycznej, ale mogą być to oczywiście inne właściwości) prowadzi do optymalizacji ścieżki syntetycznej, czyli pozwala na ograniczenie nakładów finansowych oraz czasowych na syntezę pożądanych układów.

Przedstawione w Autoreferacie badania można logicznie pogrupować w następujące bloki:

1. weryfikacja skuteczności predykcyjnej metod opartych na teorii funkcjonału gęstości do opisu właściwości foto-fizycznych wybranych związków (prace [H1]-[H3], [H10]-[H12]);
2. kontrola wpływu czynników strukturalnych i elektronowych na właściwości cząsteczek badanych fluoroforów w kontekście zależności struktura-właściwość foto-fizyczna, pozwalających na uogólnienie strategii stosowanych w racjonalnym projektowaniu fluoroforów (prace [H1], [H4]-[H7]);
3. badanie wpływu otoczenia fluoroforu na jego właściwości fotofizyczne ze szczególnym uwzględnieniem obecności rozpuszczalnika, agregacji cząsteczek fluoroforów oraz klatek



lub matryc o różnej naturze (prace [H2]-[H5], [H8]-[H9]);

4. praktyczne wykorzystanie wyników obliczeń teoretycznych do przewidywania i wyjaśniania właściwości chromoforów obserwowanych eksperymentalnie, ze szczególnym uwzględnieniem aspektów metodologicznych pozwalających na bezpośrednie porównywanie wybranych wielkości (prace [H9]-[H12]).

W opinii Recenzenta, który patrzy na te wyniki jako użytkownik-praktyk, nie jako teoretyk, przedstawione w ramach prac [H1]-[H12] badania stanowią mocną przesłankę, że metody teoretyczne chemii kwantowej mogą stanowić kluczowe narzędzie w projektowaniu nowych fotoaktywnych układów (oraz więcej!).

W trakcie czytania Autoreferatu narastało we mnie wrażenie, że Autorka jest dogłębnie przekonana, że czasy syntezy wielkich bibliotek związków, aby potem, *a posteriori*, wybrać z nich zaledwie kilka najlepszych struktur, powoli dobiegają końca. Z opisu samego Osiągnięcia, a szczególnie komentarzy odautorskich tam, łatwo odczytać wewnętrzne przekonanie Autorki, że zamiast ślepej syntezy wielu dziesiątków lub setek związków (co jest kosztowne i ma oczywiste negatywne efekty środowiskowe) rola planowania *in silico* będzie miała coraz większe znaczenie. Mam nadzieję, że Habilitantka zgodzi się, że prawidłowo odczytałem jej (maksymalistyczne i idealistyczne, ale zapewne uzasadnione) postrzeganie roli chemii obliczeniowej we współczesnej nauce.

* * *

Podsumowując wszystko co zostało wyżej powiedziane, stwierdzam, że Pani doktor Anna Daria Kaczmarek-Kędziera jest już w pełni ukształtowanym badaczem o sprecyzowanych horyzontach naukowych i biegłym warsztacie. Szczegółowe i sprecyzowane przyszłe *Plany Badawcze*, które przedstawiła w Autoreferacie, tylko to wrażenie potwierdzają. Jej dorobek naukowy należy uznać za wartościowy i wnoszący istotny i trwały wkład do organicznej chemii teoretycznej.

Materiał przedstawiony jako rozprawa habilitacyjna spełnia w mojej opinii wszelkie kryteria formalne i zwyczajowe stawiane tego rodzaju rozprawom. Dlatego też wnoszę do Rady Doskonałości Naukowej i odpowiednich Organów Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu o nadanie Pani dr Annie Darii Kaczmarek-Kędzierze stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych.

Karol Grela

