



Politechnika Łódzka

Instytut Techniki Radiacyjnej

Profesor dr hab. inż. Piotr Paneth

Łódź, dn. 3 lipca 2022 r.

RECENZJA

osiągnięcia naukowego i dorobku dr Anny Kaczmarek-Kędziera

Dr Anna Kaczmarek-Kędziera jest wychowanką Uniwersytetu Mikołaja Kopernika, gdzie na Wydziale Chemii w roku 2001 uzyskała tytuł magistra a cztery lata później stopień doktora. Obliczeniowy warsztat badawczy, wyuczony w tym okresie pod opieką prof. Joanny Sadlej i pogłębiony w trakcie staży podoktorskich (które wypełniają jeden z warunków ustawowych ubiegania się o stopień doktora habilitowanego) na uniwersytetach w Bochum i Jackson, znajduje zastosowanie w dalszych badaniach Habilitantki. Zawodowo dr Kaczmarek-Kędziera związana jest z macierzystą uczelnią gdzie obecnie zajmuje stanowisko adiunkta.

Dr Kaczmarek-Kędziera jako podstawę do oceny swojego osiągnięcia naukowego przedstawiła cykl 12 artykułów naukowych zebranych pod wspólnym tytułem "Projektowanie i teoretyczna charakterystyka barwników wykazujących wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie ładunku" opublikowanych na przestrzeni ostatnich dziesięciu lat (z których 5 w roku ubiegłym) w czasopiśmie o wysokiej renomie międzynarodowej, choć jedynie trzy z nich należą do najwyższej grupy czasopism (Q1) w danych obszarach badawczych. Niska liczba cytowań wynika z dość hermetycznej tematyki przy jednoczesnej dominującej roli obliczeń teoretycznych publikowanych wyników. Jedynie praca H10, w której obliczenia te stanowią wsparcie wyników doświadczalnych spotkała się z większym zainteresowaniem środowiska naukowego (17 cytowań na przestrzeni dwóch lat). Wydaje się to być wskazówką dla Habilitantki by znacząco wzmocnić współpracę z grupami naukowymi prowadzącymi badania doświadczalne w interesującej ją tematyce, co zresztą daje się zaobserwować w nowszych publikacjach (H10-12). Ze złożonych przez współautorów oświadczenia daje się wyraźnie wywnioskować wiodącą rolę dr Kaczmarek-Kędziera w obliczeniowej części publikacji. Potwierdzeniem tego faktu jest również pełnienie przez nią roli pierwszego autora (sześć razy) oraz autora korespondencyjnego (siedem razy). Ponadto jedna praca (H9), opublikowana w bardzo dobrym, choć u nas niedocenianym, czasopiśmie, J. Phys. Chem. A, jest monoautorska.



90-924 Łódź, ul. Żeromskiego 116

tel/fax: 42-631-3199, e-mail: paneth@p.lodz.pl, web: lies.p.lodz.pl



Politechnika Łódzka

Instytut Techniki Radiacyjnej

Profesor dr hab. inż. Piotr Paneth

Recenzja dorobku dr Kaczmarek-Kędziery
strona 2

Celem badań przedstawionych w cyklu publikacji składających się na osiągnięcie naukowe był teoretyczny dobór czynników strukturalnych a w konsekwencji i elektronowych, które pozwoliłyby na racjonalne kontrolowanie właściwości w celu projektowania fotoczułych układów chemicznych. Chemia obliczeniowa procesów fotofizycznych i układów wzbudzonych jest zagadnieniem znacząco bardziej skomplikowanym i mniej rozpoznany niż układów w stanie podstawowym. Dlatego prowadzone przez Habilitantkę badania wymagały specjalnej uwagi i rozpoznania. Z zadania tego dr Kaczmarek-Kędziery wywiązała się doskonale, testując i odpowiednio stosując optymalne kombinacje funkcjonałów gęstości elektronowej z odpowiednimi funkcjami baz. Kolejnym utrudnieniem było modelowanie procesów przebiegających w fazie skondensowanej. Habilitantka nie ograniczyła się do modeli ciągłych rozpuszczalnika ale niekiedy wykorzystwała również modele mieszane, w których cząsteczki rozpuszczalnika istotne z punktu widzenia danego procesu uwzględniała w postaci jawnej. Podsumowując, na przykładzie pochodnych skwaryny, przeprowadzone rozległe badania sugerują możliwość wykorzystania narzędzi obliczeniowych do dostrajania pożądanych właściwości fotofizycznych. Nie ulega dla mnie wątpliwości że przedstawiony cykl spełnia zarówno warunek powiązania tematycznego, jak i warunek znaczącego wkładu w rozwój dyscypliny.

Zwyczajowe (nie stanowiące ustawowo kryterium koniecznego) osiągnięcia Habilitantki koncentrują się wokół dydaktyki i upowszechniania chemii teoretycznej i obliczeniowej i są imponujące zarówno pod względem liczby i różnorodności prowadzonych zajęć dydaktycznych, opieki nad studentami (w tym pełnienie funkcji promotora zakończonej rozprawy doktorskiej i promotora pomocniczego) jak i różnego rodzaju workshopów i szkół. W ramach jednego z działań pełniła rolę kierownika podzadania. Habilitantka była również kierownikiem grantu naukowego OPUS. Osiągnięcia naukowe wraz z udokumentowanymi, przytoczonymi powyżej, zdolnościami dydaktycznymi i organizacyjnymi pozwalają domniemywać, że dr Kaczmarek-Kędziery jest dobrze przygotowana do samodzielności naukowej i skoncentrowania wokół siebie prężnego zespołu badawczego.

Podsumowując, na podstawie przedstawionych mi dokumentów uważam dorobek Habilitantki za spełniający zarówno wymogi zwyczajowe jak i formalne zawarte w art. 219.1, rozdział 3 Ustawy "Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce" z 30 sierpnia 2018 r. Dlatego z pełnym przekonaniem rekomenduję pozostałym członkom Komisji poparcie wniosku, zaś Radzie Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Mikołaja Kopernika nadanie stopnia doktora habilitowanego doktor Annie Kaczmarek-Kędzierze.



90-924 Łódź, ul. Żeromskiego 116

tel/fax: 42-631-3199, e-mail: paneth@p.lodz.pl, web: lies.p.lodz.pl