

Prof. dr hab. Szczepan Roszak  
Katedra Chemii Fizycznej i Kwantowej  
Wydział Chemiczny Politechniki Wrocławskiej  
e-mail: [szczepan.roszak@pwr.edu.pl](mailto:szczepan.roszak@pwr.edu.pl)

Wrocław, 7. 06. 2022 r.

**Ocena dorobku naukowego i recenzja rozprawy habilitacyjnej pani dr Anny Kaczmarek-Kędziery „Projektowanie i teoretyczna charakterystyka barwników wykazujących wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie ładunku”**

**Uwagi ogólne**

Dotychczasowa kariera pani doktor Anny Kaczmarek-Kędziery jest ściśle związana ze środowiskiem chemii teoretycznej Wydziału Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika. Środowisko to jest rozpoznawalne jako bardzo aktywna grupa w dziedzinie chemii teoretycznej i jest znakomitym miejscem dla zdobycia wiedzy, doświadczenia i rozwoju młodego naukowca, w tym dla osiągnięcia samodzielności naukowej. Prace dyplomowe oraz dysertacja doktorska, wykonane pod opieką prof. Andrzeja Sadleja, były gwarantem jej dobrego przygotowania merytorycznego. Dodatkowo, długoterminowe pobyty na stażach w znakomitych laboratoriach w Jackson State University oraz Ruhr-Universität Bochum pozwoliło habilitantce na wszechstronny rozwój. Ponad dwudziestoletnie uprawianie nauki zaowocowało 55 publikacjami z których 50 to wyniki pracy już po doktoracie. Z tego zestawu 12 prac zostało wybranych jako dorobek habilitacyjny, prace te są w naturalny sposób zanurzone w całkowitym dorobku habilitantki. Wybór ten zostanie omówiony oddzielnie. Prawie cała uprawiana działalność dotyczy aplikacyjnego zastosowania teorii (w większości chemii kwantowej) wspartą ambicjami interpretowania i wspomaganie badań eksperymentalnych. Większość badań łączy zainteresowanie oddziaływaniami molekularnymi. Prace badaczki zostały zauważone przez środowisko naukowe, są często cytowane co znajduje swoje

odbicie w indeksie Hirscha oraz w innych miernikach naukometrycznych. Dorobek kandydatki i jego formalna ocena są powyżej standardu oczekiwanego od kandydata do stopnia do którego pani doktor obecnie aspiruje. Ważniejsze, że prace te wnoszą nietrywialny wkład w rozwój nauki i w szczególności do wiedzy o materiałach.

### **Recenzja rozprawy habilitacyjnej.**

Osiągnięcie naukowe „**Projektowanie i teoretyczna charakterystyka barwników wykazujących wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie ładunku**” przedstawione w celu otrzymania stopnia naukowego doktora habilitowanego składa się z cyklu 12 oryginalnych prac opublikowanych w renomowanych pismach naukowych o cyrkulacji światowej. Ułatwia to pracę recenzenta jako, że prezentowane publikacje przeszły już przez sito surowych recenzentów redakcyjnych. Tytuł rozprawy dobrze charakteryzuje treść zawartą w publikacjach. Wartością dodaną dla badań teoretycznych jest bliska współpraca dr Kaczmarek-Kędziery z laboratoriami eksperymentalnymi i jej częsty udział w interpretacji wyników pomiarów. W połowie publikacji kandydatka jest jedynym teoretykiem. Główny udział habilitantki w części teoretycznej przedstawionych prac nie budzi wątpliwości, co wynika również z oświadczeń współautorów. Autorka ma też udział w dyskusji wyników eksperymentalnych. Dodatkowo dołączono szczegółowy autoreferat, który w części dotyczącej dorobku habilitacyjnego stanowi powtórne, całkiem szczegółowe (zbyt szczegółowe w opinii recenzenta) omówienie artykułów. Recenzent preferuje czytanie oryginalnych prac i na nie głównie skierował swoją uwagę. Omówienie „metodologii badań” podkreśla kompetencje badaczki i mogło być pominięte jako, że po przeczytaniu publikacji, recenzent nie mógł mieć na ten temat wątpliwości. Przedstawione publikacje mają charakter podstawowy, pomimo, że badane układy kojarzą się z zastosowaniami praktycznymi. Według autorki „celem prac zebranych w ramach ... opracowania było ... określenie sekwencji czynników strukturalnych i elektronowych, umożliwiających kontrolowane

dostrajanie właściwości fotofizycznych cząsteczek wykazujących wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie ładunku, a także ocena stosowalności narzędzi chemii obliczeniowej w racjonalnym projektowaniu układów fotoczułych.” W mojej ocenie cel został osiągnięty, chociaż wybór badanych układów nie wydaje się być zbyt agresywny. Oczekiwany wpływ badanych czynników (oddziaływania molekularne, agregacja, wpływ podstawników CT) na ewolucję interesujących badaczkę właściwości nie był zbyt duży, co zresztą zostało potwierdzone przez rezultaty badań. Jako przykład można podać potencjalne związki zbierające światło w technologii ogniw słonecznych uczulanych barwnikami w których ważny jest zakres zbierania światła w widmie widzialnym słońca a proponowane modyfikacje raczej nie wprowadzały większej zmiany w tym zakresie.

Prace znajdujące się w wyborze, pomimo ich szerokiego zakresu, mają cechy wspólne i mieszczą się w polu poszukiwań określonym w tytule osiągnięcia. Można uznać, że wyjątek stanowi włączona praca jednoautorska – widać, że habilitantka chciała podkreślić swoją samodzielność i dojrzałość, co jest dla recenzenta i tak oczywiste po oglądzie pozostałego dorobku.

Osiągnięcie stopnia naukowego to dobry moment na zastanowienie się nad swoją przyszłością. W rozdziale „Plany naukowe” w autoreferacie habilitantka opisuje je standardową kontynuację dotychczasowej działalności. Wolałbym jednak poznać ideę do której odwołuje się Ustawa: Tytuł profesora może być nadany osobie, która: 1) posiada stopień naukowy doktora habilitowanego oraz: a) wybitne osiągnięcia naukowe . . . .

### **Ocena działalności dydaktycznej**

Habilitantka posiada bogaty dorobek dydaktyczny, wynikający w dużej mierze z zatrudnienia w Uniwersytecie. Prowadziła szereg, różnego rodzaju zajęć chemii oraz innych dziedzin nauki. Wiele z prowadzonych zajęć było poprzedzonych opracowaniem autorskich programów. Dodatkowo dr Kaczmarek-Kędziera była zaangażowana w inne działania dydaktyczne takie jak

np. organizację i prowadzenie szkół naukowych czy udział w programach dotyczących potencjału dydaktycznego UMK. Dwudziestoletnia działalność dydaktyczna wskazuje, że habilitantka jest doświadczonym i samodzielnym nauczycielem akademickim.

### **Podsumowanie**

Przedstawiony do oceny materiał pozwala stwierdzić, że dr Anna Kaczmarek-Kędziera jest w pełni ukształtowanym, samodzielnym i ambitnym naukowcem. Jej profesjonalizm nie budzi wątpliwości. Habilitantka posiada szeroki i oryginalny dorobek naukowy poparty publikacjami w bardzo dobrych czasopismach naukowych oraz inną działalnością w przestrzeni nauki (udział w konferencjach naukowych, recenzje artykułów w pismach naukowych, edytorstwo wydawnictw naukowych, recenzje programów badawczych). Opieka nad pracami dyplomowymi oraz pełnienie funkcji promotora pomocniczego wskazuje na rozsądne przygotowanie kandydatki do tworzenia własnej grupy badawczej. Dr Anna Kaczmarek-Kędziera, zgodnie z wymaganiami Art. 219.1 Ustawy „posiada w dorobku osiągnięcia naukowe stanowiące znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny, w tym cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach naukowych i wykazuje się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni w szczególności zagranicznej”. Jej dorobek świadczy o prawidłowo przebiegającej karierze naukowej i zrozumieniu charakteru takiej pracy. Zaproponowana działalność po habilitacji, jako przedłużenie dotychczasowej działalności, jest zbyt zachowawcze. Mam nadzieję, że habilitantka w przyszłości poświęci więcej czasu na rozważania o swojej przyszłości. Okres przed habilitacją to czas zdobywania doświadczeń typu „postdoc”. Uzyskana samodzielność wymaga świadomego dalszego rozwoju typu budowania własnej grupy badawczej i świadomego określenia swojego miejsca w nauce. Działalność naukowa, jako oczekiwania profesorskie i poszerzone możliwości, powinna być szersza, głębsza i ambitniejsza niż dotychczas. Dr Kaczmarek-Kędziera posiada

wystarczające doświadczenie i kompetencje aby świadomie kreować swoją działalność profesjonalną.

### **Ocena końcowa**

Uważam, że przedstawiony do recenzji materiał potwierdza spełnienie ustawowych warunków stawianych kandydatom do uzyskania stopnia doktora habilitowanego określone w ustawie z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. poz. 1668) i dorobek naukowy kandydatki uzasadnia nadanie Jej tego stopnia. Wobec tego stawiam wniosek o dopuszczenie dr Anny Kaczmarek-Kędziery do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania jej stopnia doktora habilitowanego.



Szczepan Roszak