

Prof. dr hab. Artur Michalak  
Zakład Chemii Teoretycznej  
Wydział Chemii  
Uniwersytet Jagielloński  
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków  
tel. +48-12-686-2381  
fax. +48-12-686-2750  
e-mail: [michalak@chemia.uj.edu.pl](mailto:michalak@chemia.uj.edu.pl)



UNIWERSYTET  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

Kraków, 7 stycznia 2019

Wydział Chemii

**Ocena dorobku naukowego dr inż. Anny Komasy  
oraz jej osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę  
przewodu habilitacyjnego, przedstawionego pod tytułem  
*„Synteza, analiza strukturalna i spektroskopowa  
oraz modelowanie kwantowochemiczne  
soli i betain zawierających czwartorzędową grupę amoniową”***

**Dr inż. Anna Komasa ukończyła** studia na Wydziale Technologii Chemicznej Politechniki Poznańskiej w 1989 r., **uzyskując dyplom magistra inżyniera chemii, jako „*primus inter pares*”**, praca magisterska zatytułowana *„Ekstrakcja kwasów nieorganicznych pochodnymi amin i alkoholami”* została wykonana pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Jana Szymanowskiego). W latach 1989-1997 **Habilitantka zatrudniona była na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu na stanowisku asystenta. Pracę doktorską, zatytułowaną „*Równowaga prototropowa w kompleksach zasad azotowych i tlenowych z fenolami.*”, obroniła w 1997 r. uzyskując stopień doktora nauk chemicznych; promotorem był prof. dr hab. Mirosław Szafran. Po doktoracie, dr inż. Anna Komasa została zatrudniona na stanowisku adiunkta na Wydziale Chemii UAM, gdzie pracuje w chwili obecnej (najpierw w Zakładzie Fizycznej Chemii Organicznej, a aktualnie w Pracowni Chemii Związków Heterocyklicznych).**

ul. Gronostajowa 2

30-387 Kraków

tel. +48 12 686 26 00

fax +48 12 686 27 50

[sekretar@chemia.uj.edu.pl](mailto:sekretar@chemia.uj.edu.pl)

[www.chemia.uj.edu.pl](http://www.chemia.uj.edu.pl)

Z przedstawionej dokumentacji wynika, że **dr inż. Anna Komasa nie odbywała zagranicznych staży naukowych, co jest w mojej opinii istotnym brakiem**, który niestety może być trudno nadrobić w przyszłości, po osiągnięciu pełnej samodzielności naukowej. **Oceniając ten fakt, jak również całość dorobku naukowego Habilitantki, należy jednak mieć na uwadze, że trzykrotnie przebywała ona na urlopach macierzyńskich i wychowawczych, łącznie przez okres prawie 10 lat** (lipiec 1997 – wrzesień 2000; wrzesień 2002 – luty 2005; maj 2008 – kwiecień 2012).

**Rozprawę habilitacyjną dr inż. Anny Komasy stanowi cykl 14 oryginalnych, spójnych tematycznie publikacji, opatrzonych 67-stronicowym komentarzem.** Prace stanowiące podstawę rozprawy habilitacyjnej opublikowane w czasopismach o zasięgu międzynarodowym znajdujących się na tzw. liście filadelfijskiej: *Journal of Molecular Structure* (7 prac), *Vibrational Spectroscopy* (4 prace), *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* (3 prace). **Łączna wartość współczynnika oddziaływania tych prac to IF = 25,88** (średnio na pracę 1.85).

Publikacje stanowiące osiągnięcie habilitacyjne dr inż. Anny Komasy zostały opublikowane w latach 2007-2018, ale należy podkreślić, że **tylko cztery spośród nich to prace starsze (2007, 2008), pozostałych 10 opublikowano w ostatnich latach, tj. w l. 2015-2018.**

**Większość publikacji cyklu habilitacyjnego to prace wieloautorskie (3-5 współautorów).** Jedna praca (H12; 2018 r.) jest publikacją monoautorską. Przedłożona dokumentacja zawiera oświadczenia Habilitantki oraz współautorów dotyczące ich wkładu w prace cyklu habilitacyjnego; w większości przypadków wkład współautorów oszacowany jest także procentowo. **Oświadczenia te zdecydowanie wskazują, że wkład dr inż. Anny Komasy we wszystkich publikacjach wieloautorskich jest dominujący** (określony przez Habilitantkę poziomie 60-90% w przypadku 13 prac, a w jednej na poziomie 30%). **W przypadku 7 prac Habilitantka jest pierwszym autorem.**

Tematyka przedstawionej rozprawy habilitacyjnej dotyczy badań z zakresu szeroko pojętej fizycznej chemii organicznej nad solami i betainami zawierającymi czwartorzędowe sole amoniowe w kontekście opisu wpływu występujących w danych związkach oddziaływań na tworzone struktury. **W mojej opinii na szczególne podkreślenie zasługuje tematyczna spójność osiągnięcia habilitacyjnego dr inż. Anny Komasy, a jednocześnie bardzo szeroki zakres badań i zastosowanych metod** obejmujący m.in. opracowanie metod syntezy badanych układów i ich przeprowadzenie, zbadanie ich własności spektroskopowych (IR, NMR, UV-Vis), interpretacje wyników spektroskopowych w oparciu o przeprowadzone samodzielnie obliczenia kwantowo-chemiczne, charakterystykę oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych w izolowanych cząsteczkach i fazie skondensowanej w oparciu o badania krystalograficzne, spektroskopowe oraz obliczenia teoretyczne, a także w



**przypadku niektórych zbadanych układów, opisanie występujących równowag kwasowo-zasadowych i tautomerycznych.**

Jednym z **głównych celów** przeprowadzonych badań było **modelowanie i charakterystyka układów tworzących wiązania wodorowe o różnej mocy i geometrii, które decydują o różnorodności strukturalnej oraz właściwościach tych układów.** W ramach przeprowadzonych badań Habilitantka **opracowała metodę i przeprowadziła syntezę 22 związków.** Dla 13 spośród nich wyznaczone zostały po raz pierwszy struktury krystalograficzne.

Punktem wyjściowym przeprowadzonych przez dr inż. Annę Komasę badań składających się na osiągnięcie habilitacyjne była praca H1, opublikowana w 2007 r., dotycząca charakterystyki kompleksów kwasu 4-piperydonakarboksylowego z chlorowodem. W przypadku tej pracy, Habilitantka przeprowadziła syntezę oraz wykonała badania spektroskopowe. Należy dodać, że w przypadku pracy H1, obliczenia teoretyczne wykonane zostały przed prof. dr hab. M. Szafrana; obliczenia teoretyczne, których wyniki przedstawione są w pozostałych pracach, były uzyskane osobiście przez Habilitantkę. Prace H2 i H3 (opublikowane w 2008 i 2016 r.) dotyczą kompleksów kwasu 4-piperydonakarboksylowego z kwasem monochlorooctowym oraz z 2,6-dichloro-4-nitrofenolem. Obiektem badań, których wyniki przedstawiono w kolejnych pracach cyklu, H4-H7 (2015, 2016 r.) są kompleksy dimetylofenylobetainy 4-N,N,N-trimetyloamoniobezoesu z kwasami nieorganicznymi, karboksylowymi i 2,6-dichloro-4-nitrofenolem. prace H8-H10 (dwie pierwsze z r. 2007, ostatnia - 2017) dotyczą betain mezomerycznych (pochodnych Nalkilo-3-oksypirydyniowych), a prace H11-H13 (2016, 2018 r.) - dimerów 3-hydroksypirydyny i 3-hydroksymetylopirydyny. Ostatnia praca w cyklu, H14, opisują syntezę i charakterystykę soli metali - tetrabromomiedzianu(II) i tetrabromocynkanu(II) bis(3-hydroksymetylopirydynio) propanu. Dodatkowo należy podkreślić, że w pracy H13 (2018 r.) dibromki dimerów 3-hydroksypirydyniowych i 3-hydroksymetylopirydyniowych zostały także przebadane pod kątem ich właściwości fungistatycznych; **badania te, przeprowadzone we współpracy z grupa z Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu były realizowane w ramach kierowanego przez Habilitantkę projektu z Funduszy Norweskich, dodatkowo z udziałem Norwegian Forest and Landscape Institute.**

Warto podkreślić, że w kontekście doboru i systematycznego poszerzania spektrum uwzględnionych układów, badania stanowiące podstawę osiągnięcia habilitacyjnego dr inż. Anny Kolasy, jawią się jako bardzo dobrze zaplanowane, całościowe i systematyczne studium, realizowane na przestrzeni wielu lat.



Szereg uzyskanych szczegółowych wyników/wniosków Habilitantki o istotnym znaczeniu naukowym został świetnie podsumowany przez Autorkę w obszernym, doskonale napisanym komentarzu, w szczególności w rozdz. 3.3.7 (*Podsumowanie i Wnioski*). Nie będę w tym miejscu szczegółowo wymieniał ich wszystkich. Podkreślę tylko, że wyniki mające wpływ na rozwój dyscypliny dotyczą zarówno części syntetycznej, charakterystyki spektroskopowej, jak i opisu / zrozumienia wpływu występujących oddziaływań, w szczególności wiązań wodorowych na tworzone struktury oraz właściwości badanych układów.

O znaczeniu osiągnięcia habilitacyjnego dr inż. Anny Komasy świadczy m.in. odbiór jej prac przez środowisko naukowe, odzwierciedlony liczbą cytowań. Publikacje stanowiące podstawę habilitacji cytowane były już 303 razy (wg. bazy Web of Science w momencie przygotowywania recenzji). Praca H1 (opublikowana w 2007 r.) cytowana była dotychczas 251 razy; liczba cytowań pozostałych prac wynosi 52, co jest także liczbą dużą, biorąc pod uwagę, że są to w większości prace opublikowane niedawno.

Podsumowany w dokumentacji całkowity dorobek naukowy dr inż. Anny Komasy obejmuje 66 prac, z których 54 to publikacje naukowe w czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej; łączna wartość współczynnika oddziaływania (*Impact factor*) prac Habilitantki wynosi  $IF=97$ . Prace Habilitantki opublikowane zostały, m.in. w *Cryst. Eng. Comm.*, *Photoch. Photobio. Sciences*, *Spectr. Acta A*, *J. Photoch. Photobio. A*, *J. Photoch. Photobio. C (JPPA)*, *Supra. Mol. Chem.*, *Vibr. Spectrosc.*, *Chem. Phys.*, *J. Mol. Struct.* Dorobek naukowy opublikowany po uzyskaniu stopnia naukowego doktora to łącznie 60 publikacji. Jest to dorobek bardzo dobry na tym etapie kariery, a biorąc pod uwagę wspomniane wcześniej, długie okresy urlopów macierzyńskich i wychowawczych, uważam, że jest to dorobek imponujący.

Wyniki badań naukowych prowadzonych przez dr inż. Annę Komasę znajdują oddźwięk w literaturze, czego wymiernym dowodem jest liczba cytowań wynosząca, zgodnie z dokumentacją zależnie od bazy danych, ok. 600-800 oraz wartość indeksu Hirscha  $h = 11/12$

Habilitantka wielokrotnie prezentowała wyniki swoich badań naukowych na międzynarodowych i krajowych konferencjach i sympozjach naukowych. Łączna liczba prezentacji wynosi 52. Warto podkreślić, że wśród wymienionych w dokumentacji prezentacji konferencyjnych znajduje się 8 wykładów.

Omawiając dorobek naukowy Habilitantki z uznaniem należy także odnotować wspomniany wcześniej fakt, kierowania (jako koordynator Grupy Badawczej oraz koordynator uczelniany i dysponent środków finansowych z ramienia UAM) Projektem Centrum Badań i Rozwoju z Funduszy Norweskich (Norway Grants), realizowanego we współpracy z Uniwersytetem Przyrodniczym w Poznaniu i Norwegian Forest and Landscape Institute. Habilitantka była także wykonawcą w dwóch grantach KBN.



Wyrazem rozpoznawalności naukowca są m.in. zaproszenia do wykonywania recenzji dla renomowanych międzynarodowych czasopism naukowych. W dokumentacji przewodu habilitacyjnego wymienione są na razie tylko 2 recenzje artykułów naukowych dla *Journal of Molecular Structure*, ale biorąc pod uwagę dorobek Habilitantki z ostatnich lat można spodziewać się szybkiego wzrostu liczby zaproszeń.

**Dr Anna Komasa od szeregu lat prowadzi zajęcia dydaktyczne** na Wydziale Chemii UAM, które w ciągu wielu lat jego zatrudnienia na stanowisku asystenta oraz adiunkta laboratoryjne i ćwiczeniowe w ramach przedmiotów (*Podstawy chemii organicznej laboratorium, Chemia organiczna II laboratorium, Materiały biomedyczne laboratorium, Metody spektroskopowe w analizie kryminalistycznej laboratorium, Metody analizy instrumentalnej w kryminalistyce laboratorium, Środki ochrony roślin laboratorium, Biochemia z elementami biologii laboratorium, Ćwiczenia rachunkowe z podstaw chemii, Chemia organiczna proseminarium, Metody spektroskopowe w chemii organicznej proseminarium*). Habilitantka kierowała dwoma laboratoriami (*Metody spektroskopowe w analizie kryminalistycznej, Metody analizy instrumentalnej w kryminalistyce*). **Habilitantka ma w swoim dorobku dydaktycznym także zajęcia dla szkół średnich, współorganizację Drzwi Otwartych dla uczniów szkół średnich. W kontekście habilitacji warto podkreślić, że dr inż. Anna Komasa opiekowała się 12 pracami dyplomowymi.**

**Podsumowując, uważam, że przedstawiony jako podstawa przewodu habilitacyjnego, spójny tematycznie cykl 14 prac dr inż. Anny Komasy stanowi istotny wkład w rozwój dyscypliny. Podobnie należy ocenić jej inne prace opublikowane po doktoracie, które nie zostały umieszczone w cyklu habilitacyjnym.** Dorobek naukowy Habilitantki, fakt kierowania projektem badawczym, a także jej dorobek dydaktyczny, świadczą o tym, że posiada ona kwalifikacje do samodzielnej pracy naukowo-badawczej. Już w chwili obecnej Habilitantka należy do rozpoznawalnych naukowców w reprezentowanej specjalności naukowej, o czym świadczy m.in. oddźwięk jej prac wyrażony liczbą cytowań.

Uważam zatem, że **przedstawione jako podstawa przewodu habilitacyjnego osiągnięcie naukowe dr inż. Anny Komasy oraz jej aktywność naukowa, potwierdzona dorobkiem naukowym poza wymienionym osiągnięciem, spełniają zawiązanie z wymaganiami** określone w *Ustawie z dnia 14 marca 2003 r o stopniach naukowych i tytułach naukowych oraz o stopniach i tytułach w zakresie sztuki*. W związku z powyższym **uważam, że nadanie pani dr. inż. Annie Komasi stopnia doktora habilitowanego jest w pełni uzasadnione.**

Prof. dr hab. Artur Michalak