

Kraków, 4 maja 2023 roku

Prof. dr hab. Grzegorz Zadora

Instytut Ekspertyz Sądowych im. Prof. dra Jana Sehna
ul. Westerplatte 9
30-033 Kraków
E-mail: gzadora@ies.gov.pl

Zespół Chemii Sądowej
Instytut Chemii
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Uniwersytet Śląski w Katowicach
ul. Szkolna 9
40-006 Katowice
E-mail: grzegorz.zadora@us.edu.pl

Recenzja

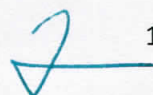
osiągnięcia naukowego pt. „*Nowe podejścia chemoinformatyczne do komputerowej oceny zagrożenia chemicznego stwarzanego przez mało liczne lub silnie zróżnicowane strukturalnie zbiory związków chemicznych*” oraz całokształtu dorobku **dr Agnieszki Gajewicz-Skrętna**, w związku z postępowaniem o nadanie jej stopnia doktora habilitowanego, w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

1. Dane ogólne

Dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna uzyskała w 2013 roku stopień doktora nauk chemicznych na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego na podstawie rozprawy doktorskiej pt. „*Opracowanie metod in silico służących przewidywaniu cytotoksycznego wpływu nanocząsteczek tlenków nieorganicznych na komórki bakterii E. coli oraz ludzkie keratynocyty (HaCaT)*”, której promotorem był prof. dr hab. Tomasz Puzyn. Po doktoracie kontynuowała pracę w zespole naukowym profesora Puzyna. Obecnie jest pracownikiem naukowo-dydaktycznym na etacie adiunkta w Pracowni Chemoinformatyki Środowiska w Katedrze Chemii i Radiochemii Środowiska na Wydziale Chemii Uniwersyteu Gdańskiego. Po uzyskaniu stopnia doktora odbyła trzy staże, w tym roczny staż podoktorski w National Institute for Environmental Studies, Research Center for Environmental Risk, Tsukuba, Japonia.

2. Ocena prac przedstawionych jako osiągnięcia będące podstawą do nadania stopnia doktora habilitowanego

Osiągnięcie naukowe dr Agnieszki Gajewicz-Skrętna, będące przedmiotem recenzji to spójny cykl dziewięciu publikacji poświęconych zastosowaniu metod chemoinformatycznych do oceny zagrożenia chemicznego stwarzanego przez związki chemiczne, dla których zebranie

 1

informacji z względnie dużej i reprezentatywnej próby (ponad 30 próbek) jest bardzo trudne, czy wręcz nie jest możliwe, tak aby można było zastosować narzędzia statystyczne dotychczas stosowane w ocenie zagrożenia chemicznego. Podjęta przez Habilitantkę problematyka badawcza dotyczy ważnego zagadnienia, z którym borykają się również inne grupy badawcze pragnące wyciągać wnioski na podstawie mało licznych grup próbek, np. do interpretacji wartości dowodowej danych fizykochemicznych dla potrzeb wymiaru sprawiedliwości i organów ścigania. W każdej z dziewięciu publikacji Habilitantka jest pierwszym autorem, jak też autorem korespondencyjnym. Przedstawione prace zostały opublikowane w czasopiśmie o bardzo wysokim współczynniku oddziaływania (łączny IF z roku publikacji wynosi 69,597). Prace te były cytowane (dane z autoreferatu): 179 (163 bez autocytowań autora) wg bazy Web of Science i 191 (74 bez autocytowań autora) wg. bazy Scopus. W przypadku publikacji, w których jest współautorem, jej udział w badaniach, opracowaniu wyników i przygotowaniu manuskryptu wynosi (obliczony na podstawie danych z oświadczeń współautorów) od 35% do 87% (praca oznaczona [H1] 80%; [H5] 35%; [H6] 77%; [H7] 80%; [H8] 87%; [H9] 80%).

Wyniki badań przedstawione w publikacjach składających się na recenzowane osiągnięcie Habilitantki pozwalają na stwierdzenie, że zrealizowała ona założone cele, np. poprzez zaproponowanie modyfikacji metody interpolacji liniowej, która polegała na zastąpieniu pojedynczej zmiennej niezależnej – pierwszą główną składową, wyrażającą liniową kombinację dwóch lub większej liczby zmiennych objaśniających, do oceny ryzyka chemicznego stwarzanego przez nanocząstki, dla których dostępność danych eksperymentalnych jest bardzo ograniczona. Wykazała również, że nieparametryczne metody uczenia maszynowego, mogą prowadzić do bardziej dokładnych oszacowań wartości odpowiedzi modelu w porównaniu z liniowymi i nieliniowymi metodami regresji, pomimo iż wykorzystują tylko niewielką część związków uczących z bezpośredniego sąsiedztwa punktu, dla którego odpowiedź jest wyznaczana. Ponadto dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna wykazała, że metoda drzew klasyfikacyjnych może być efektywnym narzędziem wspomagającym proces komputerowej oceny ryzyka chemicznego w przesiewowych badaniach (eko)toksyczności różnych grup związków chemicznych o zróżnicowanej dostępności danych eksperymentalnych. Szczególnie interesującym dla recenzenta jest to, że Habilitantka wśród swoich osiągnięć wymienia nie tylko badania zakończone pozytywnymi wynikami, ale również te, w których zidentyfikowała istotne ograniczenia metodyczne utrudniające przeprowadzenie wiarygodnej oceny dziedziny modelu dla mało licznych zbiorów związków chemicznych w oparciu o najczęściej stosowane podejście współczynników dźwigni sprzężone z wykresem Williama. Jednocześnie dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna zaproponowała rozwiązanie tego

problemu poprzez opracowanie nowego podejścia wyznaczenia granic optymalnej przestrzeni predykcyjnej modelu, dzięki czemu możliwym staje się rozróżnianie wiarygodnych prognoz od tych skrajnie niepewnych.

Podsumowując mogę stwierdzić, że przedstawiony w autoreferacie cykl publikacji jest spójny, prace te są bardzo wartościowe i stanowią oryginalne osiągnięcie naukowe.

3. Ocena dorobku naukowo-badawczego

Dorobek naukowy dr Agnieszki Gajewicz-Skrętna według informacji zawartej w autoreferacie to 58 prac naukowych, z czego aż 55 opublikowano w czasopismach z listy Journal Citation Report (dwie z trzech pozostałych prac to rozdziały w książkach), przy czym na uwagę zasługuje, że aż 50 prac opublikowano po uzyskaniu stopnia doktora (49 w czasopismach z listy Journal Citation Report oraz jeden rozdział w książce). Imponujący jest łączny współczynnik oddziaływania wynoszący (wg roku publikacji) 303,894 (z czego 251,094 przypada na publikacje wydane po uzyskaniu stopnia doktora), jak też liczba łączna cytowań: 2218 (2029 bez autocytowań autora) wg bazy Web of Science i 2415 (2211 bez autocytowań autora) wg bazy Scopus. To wszystko przekłada się na podnad przeciętny, jak na postępowanie habilitacyjne, indeks Hirsha: 24 wg bazy Web of Science oraz 25 wg bazy Scopus.

Przejawem aktywności naukowej Habilitantki są również liczne wystąpienia na konferencjach krajowych i zagranicznych oraz jej umiejętność współpracy, nie tylko z krajowymi grupami naukowymi spoza macierzystej uczelni (Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu; Politechnika Gdańska), ale również zagranicznymi grupami badawczymi (Jadavpur University, Kolkata w Indiach; Jackson State University w Stanach Zjednoczonych; National Institute of Chemistry w Ljubljanie w Słowenii).

O jej znaczącej już, moim zdaniem, pozycji w świecie nauki może świadczyć:

- a) członkostwo w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism, w tym pełnienie roli: zastępcy redaktora naczelnego w czasopiśmie „International Journal of Quantitative Structure-Property Relationships (IJQSPR)”; redaktora recenzji w czasopiśmie „Frontiers in Pharmacology - Predictive Toxicology”; redaktora tematycznego w czasopiśmie „Materials”. Habilitantka wykonała również znaczącą liczbę recenzji (ponad 120) manuskryptów dla 32 czasopism naukowych z listy Journal Citation Report;
- b) otrzymanie (po uzyskaniu stopnia doktora) m.in. stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla Wybitnych Młodych Naukowców (edycja 2014); stypendium dla młodych doktorów w ramach projektu „Program rozwoju Uniwersytetu

Gdańskiego w obszarach Europa 2020” (2014); stypendium habilitacyjne L’Oreal-UNESCO Dla Kobiet i Nauki (2017). Habilitantka jest również laureatką ogólnoświatowej nagrody dla wschodzących talentów nauki (International Rising Talents Awards L’Oréal-UNESCO For Women in Science; 2018) oraz laureatką nagrody finałowej „Nagrody Naukowe POLITYKI” w kategorii nauki ścisłe (2019).

4. Ocena dorobku dydaktycznego i organizacyjnego

Pani dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna prowadziła liczne zajęcia (wykłady, laboratoria w pracowni komputerowej, seminaria) na studiach pierwszego i drugiego stopnia na Wydziale Chemii (kierunki: chemia, biznes chemiczny, ochrona środowiska) oraz na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki (kierunek: bioinformatyka), a także zajęcia na studiach doktoranckich. Na uwagę w jej dorobku dydaktycznym zasługują:

- a) autorskie przedmioty jak : „Elementy języka R”, „QSAR i szacowanie przekrojowe w ocenie ryzyka chemicznego”, „Metody regresji i klasyfikacji”;
- b) udział w pracach zespołu programowego dla nowo tworzonej, angielskojęzycznej specjalności studiów II stopnia na kierunku Chemia - „Digital chemistry”;
- c) opieka nad projektami licencjackimi (16) i magisterskimi (8) oraz pełnienie funkcji promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim mgr Alicji Mikołajczyk (promotor: prof. dr hab. Tomasz Puzyn);
- d) działalność popularno-naukowa przybliżająca tematykę komputerowej oceny ryzyka chemicznego i wyzwań z nią związanych, w tym wywiady w prasie o zasięgu ogólnopolskim oraz w serwisach internetowych oraz praca w fundacji NANONET, której misją jest promocja i popularyzacja wiedzy oraz wspieranie badań naukowych w obszarze nanotechnologii, w tym wsparcie współpracy pomiędzy sektorem badawczo-rozwojowym a przemysłem.

W dzisiejszych czasach istotna jest również umiejętność zdobywania środków finansowych niezbędnych do realizacji projektów badawczych, którą również posiada Habilitantka. Po uzyskaniu stopnia doktora kierowała bowiem czterema projektami badawczymi finansowanymi z różnych źródeł, w tym zagranicznych (COST – European Cooperation in Science and Technology; Narodowe Centrum Nauki; Research Council of Norway; EU Horizon 2020). Łącznie brała udział w realizacji badań w ramach 11 projektów badawczych (w tym 6 po uzyskaniu stopnia doktora).

Wśród innych dokonań organizacyjnych Habilitantki podkreślić należy jej udział w 2016 roku w pracach Komisji ds. wdrożenia Europejskiej Karty Naukowca (EKN) i Kodeksu

Postępowania przy Rekrutacji Naukowców (C&C) na Uniwersytecie Gdańskim oraz udział w pracach zespołu opracowującego strategię rozwoju Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego na lata 2021-2025. Ponadto, od 2017 roku jest członkiem komitetu naukowego międzynarodowej konferencji „MOL2NET International Conference Series on Multidisciplinary Sciences”, a w latach 2018-2020 była członkiem komitetu naukowego ogólnopolskiej konferencji naukowej „Nanotechnologia wobec oczekiwań XXI w”. Zorganizowała również w 2018 roku seminarium naukowe z udziałem dr Ayako Furuhamy z National Institute for Environmental Studies (Tsukuba, Japonia) dla studentów, doktorantów oraz pracowników Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego.

5. Podsumowanie

Uwzględniając wszystkie aspekty poruszone w mojej recenzji uważam, że dokonania dr Agnieszki Gajewicz-Skrętna wnoszą oryginalny wkład w rozwój dyscypliny chemia i spełniają wymogi merytoryczne i formalne określone w ustawie o ustawie „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” z dnia 20 lipca 2018 roku (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 z późn. zm.).

Wnoszę zatem o kontynuowanie postępowania w sprawie nadania dr Agnieszce Gajewicz-Skrętna stopnia naukowego doktora habilitowanego.

PROFESOR

prof. dr hab. Grzegorz Zadora