

Załącznik nr 6

Do wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Wykaz dorobku naukowego

wersja polskojęzyczna

dr inż. Agnieszka Kącka-Zych

Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki
Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej
Katedra Chemii i Technologii Organicznej
Kraków (2024)



**Wydział Inżynierii
i Technologii Chemicznej**

I. WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY

1. Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b ustawy.

Nr	Publikacja	Impact factor (w roku opublikowania)*	Wkład habilitantki	Autor korespondencyjny
H1	Kącka-Zych A. (☒) Understanding of the stability of acyclic nitronic acids in the light of molecular electron density theory. <i>J. Mol. Graph. Model.</i> , 129 , 108754 (2024)	IF ₂₀₂₃ = 2.9	100%	tak
H2	Woliński P., Kącka-Zych A. (☒), Wróblewska A., Wielgus E., Dolot R., Jasiński R. Fully selective synthesis of spirocyclic-1,2-oxazine N-oxides via non-catalysed Hetero Diels-Alder reactions with the participation of cyanofunctionalised conjugated nitroalkenes. <i>Molecules</i> , 28 , 4856 (2023)	IF ₂₀₂₂ = 4.6	40%	tak
	Mój wkład w powstanie pracy: sformułowanie problemu naukowego, współudział w opracowaniu koncepcji badań, współudział w przeprowadzeniu badań, wykonanie obliczeń kwantowochemicznych, współudział w opracowaniu tekstu, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.			
H3	Woliński P., Kącka-Zych A. (☒), Mirosław B., Wielgus E., Olszewska A., Jasiński R. Green, one-pot synthesis of 1,2-oxazine-type herbicides via non-catalyzed Hetero Diels-Alder reactions involving (2E)-3-aryl-2-nitroprop-2-enenitriles. <i>J. Clean. Prod.</i> , 356 , 131878 (2022)	IF ₂₀₂₂ = 11.1	35%	tak
	Mój wkład w powstanie pracy: sformułowanie problemu naukowego, współudział w opracowaniu koncepcji badań, wykonanie obliczeń kwantowochemicznych, współudział w opracowaniu tekstu, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.			
H4	Kącka-Zych A. (☒), Jasiński R. Mechanistic aspects of the synthesis of seven-membered internal nitronates via stepwise [4+3] cycloaddition involving conjugated nitroalkenes: MEDT computational study. <i>J. Comput. Chem.</i> , 43 , 1221 (2022)	IF ₂₀₂₂ = 3.0	65%	tak
	Mój wkład w powstanie pracy: sformułowanie problemu naukowego, opracowanie koncepcji badań, wybór metodyki badań, przeprowadzenie badań i analiza wyników, wykonanie obliczeń kwantowochemicznych opracowanie tekstu i przygotowanie do druku, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.			
H5	Kącka-Zych A. (☒) The molecular mechanism of the formation of four-membered cyclic nitronates and their retro (3+2) cycloaddition: A DFT mechanistic study. <i>Molecules</i> , 26 , 4786 (2021)	IF ₂₀₂₁ = 4.927	100%	tak
H6	Kącka-Zych A. (☒), Jasiński R. Understanding the molecular mechanism of the stereoselective conversion of N-trialkylsilyloxy nitronates into bicyclic isoxazoline derivatives. <i>New J. Chem.</i> , 45 , 9491 (2021)	IF ₂₀₂₁ = 3.925	65%	tak

	Mój wkład w powstanie pracy: sformułowanie problemu naukowego, opracowanie koncepcji badań, wybór metodyki badań, przeprowadzenie badań i analiza wyników, wykonanie obliczeń kwantowochemicznych, opracowanie tekstu i przygotowanie do druku, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.			
H7	Kącka-Zych A. (☒), Jasiński R. Understanding the molecular mechanism of γ -elimination of nitrous acid in the framework of the Molecular Electron Density Theory. <i>J. Comput. Chem.</i> , 42 , 1195 (2021)	IF ₂₀₂₁ = 3.672	65%	tak
	Mój wkład w powstanie pracy: sformułowanie problemu naukowego, opracowanie koncepcji badań, wybór metodyki badań, przeprowadzenie badań i analiza wyników, wykonanie obliczeń kwantowochemicznych, opracowanie tekstu i przygotowanie do druku, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.			
H8	Kącka-Zych A. (☒) Understanding the uniqueness of the stepwise [4+1] cycloaddition reaction between conjugated nitroalkenes and electrophilic carbene systems with a molecular electron density theory perspective. <i>Int. J. Quantum Chem.</i> , 121 , e26440 (2021)	IF ₂₀₂₁ = 2.437	100%	tak
H9	Kącka-Zych A. (☒), Jasiński R. Molecular mechanism of Hetero Diels-Alder reactions between (E)-1,1,1-trifluoro-3-nitrobut-2-enes and enamine systems in the light of Molecular Electron Density Theory. <i>J. Mol. Graph. Model.</i> , 101 , 107714 (2020)	IF ₂₀₂₀ = 2.518	65%	tak
	Mój wkład w powstanie pracy: sformułowanie problemu naukowego, opracowanie koncepcji badań, wybór metodyki badań, przeprowadzenie badań i analiza wyników, wykonanie obliczeń kwantowochemicznych, opracowanie tekstu i przygotowanie do druku, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.			
H10	Kącka-Zych A. (☒) Push-pull nitronates in the [3+2] cycloaddition with nitroethylene: Molecular Electron Density Theory study. <i>J. Mol. Graph. Model.</i> , 97 , 107549 (2020)	IF ₂₀₂₀ = 2.518	100%	tak
H11	Kula K., Dobosz J., Jasiński R., Kącka-Zych A. (☒), Łapczuk-Krygier A., Mirosław B., Demchuk O.M. [3+2] Cycloaddition of diaryldiazomethanes with (E)-3,3,3-trichloro-1-nitroprop-1-ene: An experimental, theoretical and structural study. <i>J. Mol. Struct.</i> , 1203 , 127473 (2020)	IF ₂₀₂₀ = 3.196	25%	tak
	Mój wkład w powstanie pracy: współdziałal w sformułowaniu problemu naukowego, współdziałal w opracowaniu koncepcji badań, współdziałal w wykonaniu obliczeń kwantowochemicznych, współdziałal w opracowaniu tekstu, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.			
H12	Woliński P., Kącka-Zych A. (☒), Dziuk B., Ejsmont K., Łapczuk-Krygier A., Dresler E. The structural aspects of the transformation of 3-nitroisoxazoline-2-oxide to 1-aza-2,8-dioxabicyclo[3.3.0]octane derivatives: experimental and MEDT theoretical study. <i>J. Mol. Struct.</i> , 1192 , 27 (2019)	IF ₂₀₁₉ = 2.463	40%	tak
	Mój wkład w powstanie pracy: sformułowanie problemu naukowego, współdziałal w opracowaniu koncepcji badań, wykonanie obliczeń kwantowochemicznych, współdziałal w opracowaniu tekstu, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.			
H13	Kącka-Zych A. (☒) Understanding the Molecular Mechanism of the Rearrangement of Internal Nitronic Ester into Nitronorborene in Light of the MEDT Study.	IF ₂₀₁₉ = 3.267	100%	tak

	<i>Molecules</i> , 24 , 462 (2019)			
H14	Kącka-Zych A. (✉), Jasiński R. Unexpected molecular mechanism of trimethylsilyl bromide elimination from 2-(trimethylsilyloxy)-3-bromo-3-methylisoxazolidines. <i>Theor. Chem. Acc.</i> , 138 , 81 (2019)	IF ₂₀₁₉ = 1.498	70%	tak
Mój wkład w powstanie pracy: sformułowanie problemu naukowego, opracowanie koncepcji badań, wybór metodyki badań, przeprowadzenie badań i analiza wyników, wykonanie obliczeń kwantowochemicznych, opracowanie tekstu i przygotowanie do druku, przygotowanie odpowiedzi na recenzje.				
*) dla prac, opublikowanych w 2024 roku podano IF ₂₀₂₃ , ponieważ wartość IF ₂₀₂₄ nie była znana w momencie składania wniosku				
		Łącznie:	52.021	Śr. 69.3%

II. WYKAZ AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ

1. Wykaz opublikowanych monografii naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.1).

PO DOKTORACIE	
[1]	Jasiński R., Łapczuk-Krygier A., Kącka-Zych A. , Kula K., Demchuk O.M. Elementy preparatyki organicznej i heteroorganicznej, wyd. 2 rozszerz., Wydawnictwo Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej, Lublin (2018).
PRZED DOKTORATEM	
[2]	Jasiński R., Łapczuk-Krygier A., Kącka A. , Kula K., Demchuk O.M. Elementy preparatyki organicznej ISBN: 978-83-88100-78-9, RTN, Radom (2016).

2. Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych.

-

3. Wykaz członkostwa w redakcjach naukowych monografii.

-

4. Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (pozycje niewymienionych w pkt I.2).

PO DOKTORACIE	
[1]	Kras J., Wróblewska A., Kącka-Zych A. Unusual regioselectivity in [3+2] cycloaddition reactions between (E)-3-nitroacrylic acid derivatives and (Z)-C,N-diphenylimine N-oxide. <i>Scientiae Radices</i> , 2 , 112 (2023)
[2]	Fryzlewicz A., Olszewska A., Zawadzińska K., Woliński P., Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk-Krygier A., Jasiński R. Molecular mechanism of the formation of nitrofunctionalised 2-pyrazolines via [3+2] cycloaddition reactions between 1-EWG-activated nitroethenes and nitrylimine TAC systems. <i>Organics</i> , 3 , 59 (2021)
[3]	Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk-Krygier A., Jasiński R. Analysis of the possibility and molecular mechanism of carbon dioxide consumption in the Diels-Alder processes.

	<i>Pure and Appl. Chem.</i> , 93 , 427 (2021)
[4]	Fryźlewicz A., Kącka-Zych A. , Demchuk O.M., Mirosław B., Woliński P., Jasiński R. Green synthesis of nitrocyclopropane-type precursors of inhibitors for the maturation of fruits and vegetables via domino reactions of diazoalkanes with 2-nitroprop-1-ene. <i>J. Clean. Prod.</i> , 292 , 126079 (2021)
[5]	Kącka-Zych A. , Perez P. Perfluorobicyclo[2.2.0]hex-1(4)-ene as unique partner for Diels-Alder reactions with benzene: a density functional theory study. <i>Theor. Chem. Acc.</i> , 140 , 17 (2021)
[6]	Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk-Krygier A., Wzorek Z., Nowak A., Jasiński R. Experimental and theoretical mechanistic study on the thermal decomposition of 3,3-diphenyl-4-(trichloromethyl)-5-nitropyrazoline. <i>Molecules</i> , 26 , 1364 (2021)
[7]	Kącka-Zych A. Participation of Phosphorylated Analogues of Nitroethene in Diels-Alder Reactions with Anthracene: A Molecular Electron Density Theory Study and Mechanistic Aspect. <i>Organics</i> , 1 , 36 (2020)
[8]	Kącka-Zych A. , Rios -Gutierrez M., Domingo L.R. A Molecular Electron Density Theory study of the Lewis acid catalyzed decomposition reaction of nitroethyl benzoate using aluminium derivatives. <i>J. Phys. Org. Chem.</i> , 32 , e3938 (2019)
[9]	Łapczuk-Krygier A., Kącka-Zych A. , Kula K. Recent progress in the field of cycloaddition reactions involving conjugated nitroalkenes. <i>Current Chem. Lett.</i> , 8 , 13 (2019)
[10]	Mirosław B., Babyuk D., Łapczuk-Krygier A., Kącka A. , Demchuk O., Jasiński R. Regiospecific formation of the nitromethyl-substituted 3-phenyl-4,5-dihydroisoxazole via [3+2] cycloaddition. <i>Monatshefte fur Chemie - Chemical Monthly</i> , 149 , 1877 (2018)
PRZED DOKTORATEM	
[11]	Kącka-Zych A. , Domingo L.R., Jasiński R. Does a fluorinated Lewis acid catalyst change the molecular mechanism of the decomposition process of nitroethyl carboxylates? <i>Res. Chem. Intermediat</i> , 44 , 325 (2018)
[12]	Kącka-Zych A. , Domingo L.R., Rios-Gutierrez M., Jasiński R. Understanding the mechanism of the decomposition reaction of nitroethyl benzoate through the Molecular Electron Density Theory. <i>Theor. Chem. Acc.</i> , 136 , 129 (2017)
[13]	Jasiński R., Kula K., Kącka A. , Mirosław B. Unexpected course of reaction between (E)-2-aryl-1-cyano-1-nitroethenes and diazafluorene: why is there no 1,3-dipolar cycloaddition? <i>Monatsh. Chem. - Chemical Monthly</i> , 148 , 909 (2017)
[14]	Kącka A. , Jasiński R. A dramatic change of kinetic conditions and molecular mechanism of decomposition processes of nitroalkyl carboxylates catalyzed by ethylammonium cations. <i>Comput. Theor. Chem.</i> , 1104 , 37 (2017)
[15]	Kącka A. , Jasiński R. Triethylsulfonium and triethylphosphonium cations as novel catalysts for the decomposition process of nitroethyl benzoates. <i>Phosphorus Sulfur Silicon Relat. Elem.</i> , 192 , 1252 (2017)
[16]	Kącka A. , Jasiński R. DFT study of the decomposition reactions of nitroethyl benzoates catalyzed by the 1,3-dimethylimidazolium cation. <i>Curr. Chem. Lett.</i> , 6 , 15 (2017)
[17]	Kącka A. , Jasiński R.

	A DFT mechanistic study of thermal decomposition reactions of nitroethyl carboxylates: undermine of pericyclic insight. <i>Heteroatom Chemistry</i> , 27 , 279 (2016)
[18]	Jasiński R., Mroz K., Kačka A. Experimental and theoretical DFT study on synthesis of sterically crowded 2,3,3,(4)5-tetrasubstituted-4-nitroisoxazolidines via 1,3-dipolar cycloaddition reactions between ketonitrones and conjugated nitroalkenes. <i>J. Het. Chem.</i> , 53 , 1424 (2016)
[19]	Demchuk O.M., Kapłon K., Kačka A. , Pietrusiewicz K.M Utilisation of chiral phosphorus ligands in atroposelective cross-coupling reactions. <i>Phosphorus Sulfur Silicon Relat. Elem.</i> , 191 , 180 (2016)
[20]	Jasiński R., Kačka A. A polar nature of benzoic acids extrusion from nitroalkyl benzoates: DFT mechanistic study. <i>J. Mol. Model.</i> , 21 , 59 (2015)
[21]	Szczepanek A., Jasińska E., Kačka A. , Jasiński R. An experimental and quantumchemical study of [2+3] cycloaddition between (Z)-C-(m,m,p-trimethoxyphenyl)-N-(p-methyphenyl)-nitron and (E)-3,3,3-trichloro-1-nitroprop-1-ene: mechanistic aspects. <i>Curr. Chem. Lett.</i> , 4 , 33 (2015)
[22]	Jasiński R., Kubik M., Łapczuk-Krygier A., Kačka A. , Dresler E., Boguszevska-Czubara A. An experimental and theoretical study of the hetero Diels-Alder reactions between (E)-2-aryl-1-cyano-1-nitroethenes and ethyl vinyl ether: one-step or zwitterionic, two-step mechanism? <i>React. Kinet. Mech. Cat.</i> , 113 , 333 (2014)

5. Wykaz osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).
-
6. Wykaz publicznych realizacji dzieł artystycznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).
-
7. **Wykaz wystąpień na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych.**

a) Wykłady na zaproszenie

- [1] „Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów nitronowych”
Wykład na zaproszenie Świętokrzyskiego Oddziału Polskiego Towarzystwa Chemicznego oraz Instytutu Chemii Uniwersytetu Jana Kochanowskiego w Kielcach.
21 październik 2021
- [2] „Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów nitronowych”
Wykład na zaproszenie Sieć Badawcza Łukasiewicza – Instytut Ciężkiej Syntezy Organicznej „Błachownia” w Kędzierzynie Koźlu.
08 luty 2024
- [3] „Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów nitronowych”
Wykład na zaproszenie Zakładu Chemii Medycznej Uniwersytetu Medycznego w Lublinie.
04 marca 2024
- [4] „Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów nitronowych”
Wykład na zaproszenie Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego.

07 marca 2024

- [5] „Wybrane aspekty fizykochemii estrów kwasów nitronowych”
Wykład na zaproszenie Wydziału Chemii Uniwersytetu Łódzkiego.
19 kwietnia 2024

b) Komunikaty ustne

PO DOKTORACIE	
[1]	Woliński P., Kącka-Zych A. , Jasiński R. Jednoetapowa, zielona synteza związków z grupy 1,2-oksazyn poprzez bez katalityczną reakcję Hetero Dielsa-Aldera z udziałem (2-E)-3-arylo-2-nitroprop-2-enonitryli. XIV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa, TYGIEL mat s. 87-88, Lublin (2022)
[2]	Olszewska A., Kącka-Zych A. Cyjanofenyloacetylen jako prekursor biologicznie aktywnych połączeń. VII Ogólnopolska Sesja Studenckich Kół Naukowych, Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie, wystąpienie wyróżnione stypendium grupy Santander Szczecin (2021)
[3]	Kącka-Zych A. , Jasiński R. Understanding the molecular mechanism of the conversion of N-trialkylsilyloxy nitronates into bicyclic isoxazoline derivatives. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego mat. s. 284, S10 KS09, Łódź (2021)
[4]	Olszewska A., Kącka-Zych A. Synthesis and transformations of cyanophenylacetylene as a precursor of biologically active compounds. Annual Scientific Student's Conference at Yuriy Fedkovich Chernivtsi National University Chernivtsi, Ukraina (2021)
[5]	Olszewska A., Roczeń M., Kącka-Zych A. Decomposition of nitroethyl carboxylates catalysed by Lewis acids. Annual Scientific Student's Conference at Yuriy Fedkovich Chernivtsi National University Chernivtsi, Ukraina (2020)
PRZED DOKTORATEM	
[6]	Kula K., Kącka A. , Mirosław B., Jasiński R. Pochodne hydrazyny jako nieoczekiwany produkt reakcji diazafluorenu z wybranymi komponentami elektrofilowymi. VI Ogólnopolska konferencja „Pomiędzy naukami” mat. str. 38, Chorzów (2017)
[7]	Łapczuk-Krygier A., Kącka A. , Jasiński R. Czy ciecze jonowe mają przyszłość? XVII Konferencja naukowa „Pierwiastki chemiczne a jakość życia” mat. str. 80, Lublin (2014)

c) Komunikaty posterowe

PO DOKTORACIE	
[1]	Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk A., Jasiński R. The influence of Lewis-acid catalysts on the molecular mechanism of Diels-Alder reaction between Carbon Dioxide and cyclopentadiene. XXIII International Symposium “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” mat. s. 28, P-014, Łódź (2022)

[2]	Fryźlewicz A., Olszewska A., Zawadzińska K., Woliński P., Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk A., Jasiński R. A DFT computational study of [3+2] reactions between 2-aryl-1-cyano-1-nitroethenes and selected nitylimine systems. XXIII International Symposium “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” mat. s. 29, P-015, Łódź (2022)
[3]	Woliński P., Kącka-Zych A. , Mirosław B., Wielgus E., Jasiński R. Regioselectivity and molecular mechanism of non-catalysed HAD reactions between 2-aryl-1-cyano-1-nitroethenes and isobutene. XXIII International Symposium “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” mat. s. 31, P-017, Łódź (2022)
[4]	Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk A., Młostań G., Mirosław B., Demchuk O.M., Nowak A., Wzorek Z., Jasiński R. Understanding the (3+2)-Cycloaddition Reaction Between Diphenyl Diazomethane and (E)-3,3,3-Trichloro-1-nitroprop-1-ene: An Experimental, Theoretical and Structural Study. HALCHEM X, 10 th International Meeting on Halogen Chemistry mat. S04 PC-12, Łódź (2022)
[5]	Kącka-Zych A. , Jasiński R. Unsaturated nucleophiles as efficient initiators for nitroalkenes polymersation process. Silesian Meetings on Polymer Materials. POLYMAT, Centre of Polymer and Carbon Materials Polish Academy of Science mat. s. 48, P39, Zabrze (2022)
[6]	Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk-Krygier A., Klemeš J.J., Jasiński R. Analysis of the Possibility Conversion Carbon Dioxide to Lactones in the Diels-Alder Processes. 25 th Conference of Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction Chorwacja (2022)
[7]	Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk-Krygier A., Jasiński R. Clean and molecularly programmable protocol for preparation of lactones in the Diels-Alder processes. XI International Scientific-Technical Conference, “Advance in Petroleum and Gas Industry and Petrochemistry” mat. s. 113, Lwów, Ukraina (2022)
[8]	Zawadzińska K., Fryźlewicz A., Olszewska A., Woliński P., Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk-Krygier A., Jasiński R. Electrophilically Activated olefins in reaction with nitrogen-containing three-atom components: numerical study. XI International Scientific-Technical Conference, “Advance in Petroleum and Gas Industry and Petrochemistry” mat. s. 119, Lwów, Ukraina (2022)
[9]	Kącka-Zych A. , Pérez P. A molecular mechanism of unique example of benzene in Diels-Alder reaction in the light of MEDT study. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego mat. s. 611, S10 P006, Łódź (2021)
[10]	Kula K., Kącka-Zych A. , Łapczuk-Krygier A., Wzorek Z., Nowak A., Jasiński R. Mechanistyczne aspekty termicznej dekompozycji 3,3-difenylo-4-(trichlorometylo)-5-nitro- Δ^1 -pirazoliny. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego mat. s. 379, S01 P023, Łódź (2021)
[11]	Woliński P., Kącka-Zych A. , Demchuk O.M., Łapczuk-Krygier A., Mirosław B., Jasiński R. Clean and molecularly programmable protocol for preparation of bisheterobiarylic systems via a domino pseudocyclic reaction as a valuable alternative for TM-catalyzed cross-couplings. 63 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego

	mat. s. 386, S01 P030, Łódź (2021)
[12]	Woliński P., Kącka-Zych A. , Demchuk O.M., Łapczuk-Krygier A., Mirosław B., Jasiński R. Czysty i molekularnie programowalny protokół otrzymywania bisheterobiarylowych systemów poprzez pseudocykliczną reakcję domino jako cenna alternatywa dla reakcji sprzęgania krzyżowego katalizowanych metalami przejściowymi. XIV Kopernikańskie Seminarium Doktoranckie Organizowane przez Wydział Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu mat. S. 90, Toruń (2021)
[13]	Fryźlewicz A., Kras J., Sadowski M., Łapczuk-Krygier A., Kącka-Zych A. , Jasiński R. Green synthesis of novel nicotine analogues via cycloaddition reactions. XV International research conference proceedings, IRC mat. s. 17, Rzym, Włochy (2021)
[14]	Dresler E., Kącka-Zych A. , Kwiatkowska M., Jasiński R. A MEDT computational study on the [3+2] cycloaddition reactions of (Z)-diarylnitrones with 2-methyl-1-nitroprop-1-ene. XXI International conference "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds" mat. P-041, Łódź (2018)
[15]	Woliński P., Kącka-Zych A. , Regio- and stereoselectivity of [3+2] cycloadditions between 3-nitroisoxazoline N-oxide and monosubstituted ethenes. XXI International conference "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds" mat. P-003, Łódź (2018)
[16]	Mirosław B., Babyuk D., Łapczuk-Krygier A., Kącka-Zych A. , Demchuk O.M., Jasiński R. Regioselectivity of [3+2] cycloaddition between benzonitrile N-oxide and 3-nitroprop-1-ene. XXI International conference "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds" mat. P-002, Łódź (2018)
[17]	Kącka-Zych A. , Domingo L.R., Jasiński R. Influence of Lewis-acid catalyst on the molecular mechanism of thermal decomposition of nitroalkyl carboxylates. XXI International conference "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds" mat. P-001, Łódź (2018)
[18]	Jasiński R., Kula K., Kącka-Zych A. , Mirosław B. Zwitterionic mechanism of reactions between diazaluorene and selected conjugated nitroalkenes: comprehensive experimental and theoretical study. ОТ СИНТЕЗА ПОЛИЭТИЛЕНА ДО СТЕРЕОДИВЕРГЕНТНОСТИ: РАЗВИТИЕ ХИМИИ ЗА 100 ЛЕТ mat. s. 43, Rosja (2018)
[19]	Demchuk O.M., Kącka-Zych A. , Mirosław B., Babyuk D., Łapczuk-Krygier A. Jasiński R. Eksperymentalne i teoretyczne studia nad regiochemią reakcji 3-nitroprop-1-enu z N-tlenkiem benzonitrylu. XI Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej Warszawa (2017)
PRZED DOKTORATEM	
[20]	Kącka-Zych A. , Domingo L.R., Rios- Gutiérrez M., Jasiński R. A modern view on decomposition reaction of 2-nitroethyl benzoate using ELF and MEDT theory. XX International conference "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds" mat. P-012 Łódź (2017)
[21]	Kula K., Kącka A. , Mirosław B., Jasiński R.A. Diazofluorene as 1,3-dipole in reactions with conjugated systems of alkenes functionalized electrophile groups. The 4-th Interantional Summer School, International research and practice conference: Nanotechnology and Nanomaterials Chernivtsi, Ukraina (2017)

[22]	Kačka A. , Jasiński R. Non-pericyclic nature of thermal decomposition of nitroethyl carboxylates. XIX International conference “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” mat. P-012, Łódź (2016)
[23]	Kula K., Kačka A. , Mirosław B., Jasiński R. Diazafluorene as 1,3-dipole in reactions with conjugated nitroalkenes. XIX International conference “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” mat. P-014, Łódź (2016)
[24]	Jasiński R., Mróz K., Kačka A. 1,3-Dipolar cycloaddition of selected ketonitrones with 2-EWG-substituted nitroethenes. XVIII International conference “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” mat. P-003, Łódź (2015)
[25]	Łapczuk-Krygier A., Kačka A. , Rykała K., Kula K., Jasiński R. Some examples of nitroaldol reactions catalyzed by ionic liquids. XVII International conference “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” mat. P-021, Łódź (2014)
[26]	Jasiński R., Kubik M., Łapczuk-Krygier A., Kačka A. , Dresler E., Boguszewska-Czubara A. Experimental and theoretical study of the polar D-A reaction between (E)-2-aryl-1-cyano-1-nitroethenes and vinyl-ethyl ether: mechanistic aspects. XVII International conference “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” mat. P-019, Łódź (2014)
[27]	Hyrdyjewska A., Bernasiuk A., Jasiński R., Horecka A., Popiołek Ł., Boguszewska-Czubara A., Łapczuk-Krygier A., Kačka A. , Malm A., Kurzepa J. The antimicrobial activity of novel compounds from nitroalkeny and norbornene group. XVII Konferencja naukowa „Pierwiastki a zdrowie” mat. str. 35, Lublin (2014)
[28]	Jasiński R., Łapczuk-Krygier A., Kačka A. , Kubik M., Barański A. Indeksy globalnej elektrofilowości – nowe narzędzie prognozowania reaktywności sprzężonych nitroalkenów w procesach [4+2] cykloaddycji do sprzężonych dienów. XVII Sympozjum „Kinetyczne metody badania mechanizmów reakcji w roztworach” mat. P-5, Poznań (2013)

8. Wykaz udziału w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji.

-

9. Wykaz uczestnictwa w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.

PO DOKTORACIE

[1]	Kierownik i wykonawca projektu badawczego nr PLG/2023/016638 pod tytułem „Badania nad mechanizmem otrzymywania i właściwościami estrów nitronowych” (ID „plgmedt1”) realizowanego w formie grantu obliczeniowego w centrum obliczeniowym ACK Cyfronet AGH na klastrze „Ares” i finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2023-2024).
[2]	Wykonawca projektu badawczego nr ERANet-LAC/3/GreenMol/3/2019, pod tytułem „Opracowanie zielonych molekuł z biomasy lignocelulozowej dla chemii odnawialnej” w ramach konkursu ERANet-LAC 3rd Multi-Thematic Join Call 2017/2018 (12.2020-12.2022).

[3]	Kierownik i wykonawca projektu badawczego nr PLG/2021/015101 pod tytułem „Badanie mechanizmów reakcji w świetle teorii MEDT” (ID „plgmedt”) realizowanego w formie grantu obliczeniowego w centrum obliczeniowym ACK Cyfronet AGH na klastrze „Prometeusz” i finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2021-2022).
[4]	Kierownik projektu badawczego pod tytułem: „Reakcje hetero-Dielsa-Aldera (HDA) izobutenu do wybranych nitroalkenów” otrzymanego w ramach subwencji na finansowanie działalności naukowej służącej rozwojowi młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej (2021).
[5]	Kierownik i wykonawca projektu badawczego nr PLG/2020/014148 pod tytułem „Badanie mechanizmów reakcji w świetle teorii MEDT” (ID „plgelf”) realizowanego w formie grantu obliczeniowego w centrum obliczeniowym ACK Cyfronet AGH na klastrze „Prometeusz” i finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2020-2021).
[6]	Kierownik i wykonawca projektu badawczego nr PLG/2019/013083 pod tytułem „Teoretyczne badania nad mechanizmami otrzymywania związków potencjalnie aktywnych biologicznie” (ID „medt”) realizowanego w formie grantu obliczeniowego w centrum obliczeniowym ACK Cyfronet AGH na klastrze „Prometeusz” i finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2019-2020).
[7]	Kierownik i wykonawca projektu badawczego nr PLG/2018/011944 pod tytułem „Teoretyczne badania nad zastosowaniem przyjaznych środowisku technik do otrzymywania bioaktywnych nitrozwiązków – potencjalnych farmaceutyków” (ID „medt”) realizowanego w formie grantu obliczeniowego w centrum obliczeniowym ACK Cyfronet AGH na klastrze „Prometeusz” i finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2018-2019).
[8]	Kierownik projektu badawczego nr C-2/493/2018/DS-M, pod tytułem: „Teoretyczne badania nad zastosowaniem przyjaznych środowisku technik do otrzymywania bioaktywnych nitrozwiązków – potencjalnych farmaceutyków” realizowanego w ramach funduszu DS Politechniki Krakowskiej i finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2018).

PRZED DOKTORATEM

[9]	Wykonawca projektu badawczego nr BES-2014-068258 finansowanego przez Ministerstwo Gospodarki i Konkurencyjności (MINECO) Rządu Hiszpańskiego (CTQ2016-78669-P) (2016-2017).
[10]	Kierownik i wykonawca projektu badawczego nr PLG/2016/009638 pod tytułem „Obliczenia DFT reakcji dekompozycji estrów nitroalkilowych katalizowanych kwasami Lewisa” (ID „oblkacka1”) realizowanego w formie grantu obliczeniowego w centrum obliczeniowym ACK Cyfronet AGH na klastrze „Prometeusz” i finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2016-2017).
[11]	Wykonawca projektu badawczego nr 2012/05/B/ST5/00362, pod tytułem „Projektowanie oraz synteza katalizatorów o właściwościach specjalnych, w tym chiralnych, rozpuszczalnych w wodzie i immobilizowanych w/na perfluorowanych i stałych nośnikach. Zastosowanie w syntezach prowadzonych w przyjaznych środowisku warunkach” w ramach konkursu OPUS-3 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki (03.2013-09.2017).
[12]	Kierownik i wykonawca projektu badawczego nr PLG/2015/006108 pod tytułem „Obliczenia DFT wybranych reakcji pericyklicznych” (ID „oblkacka”) realizowanego w formie grantu obliczeniowego w centrum obliczeniowym ACK Cyfronet AGH na klastrze „Zeus” i finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (2015-2016).

10. Wykaz członkostwa w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.

-

11. Wykaz staży w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.

Miejsce odbycia stażu		Data
PO DOKTORACIE		
[1]	Universidad Andrés Bello, Departamento de Ciencias Químicas, Chile, <i>staż naukowy</i>	08.03-22.03.2020
[2]	Universidad de Valencia, Departamento de Química Orgánica, Unidad de Investigación Química Orgánica Teórica, Hiszpania, <i>staż naukowy</i>	11.02-20.02.2019
[3]	Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk, <i>staż naukowy</i>	08.11.2018-09.01.2019
PRZED DOKTORATEM		
[4]	Universidad de Valencia, Departamento de Química Orgánica, Unidad de Investigación Química Orgánica Teórica, Hiszpania <i>staż naukowy</i>	18.07-25.07.2016
[5]	Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, <i>staż naukowy</i>	09-10.2012
[6]	Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, <i>staż naukowy</i>	01.07-31.07.2012

12. Wykaz członkostwa w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.).

- [1] „Current Chemistry Letters” – Editor in Chief (04.2020- obecnie)
- [2] „Materials” – Topic Editor (03.2021- obecnie)
- [3] „Compounds” – Editorial Board Members (06.2021- obecnie)
- [4] „Chemistry” – Review Board (06.2021- obecnie)
- [5] “Chemistry of Heterocyclic Compounds” – Guest Editor zeszytu specjalnego “Synthesis and properties of heterocyclic compounds in the light of the quantum-chemical studies” (12.2023-10.2024)

13. Wykaz recenzowanych prac naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.

Oprócz prowadzenia badań własnych, zajmowałam się również recenzowaniem dorobku naukowego innych zespołów badawczych. W szczególności, przygotowałam łącznie 62 recenzji artykułów z listy *Journal of Citation Reports*.

Czasopismo	Rok							Łącznie
	2018	2019	2020	2021	2022	2023	2024	
RSC Advances	2	2	3					7
International Journal of Quantum Chemistry	1							1
Physical Chemistry Chemical Physics	1	1		1				3
Heteroatom Chemistry	1							1

Computational and Theoretical Chemistry	1							1
Journal of Molecular Structure	1							1
Molecules		3	5	7	4	1		20
Symmetry		1						1
Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements		1						1
Theoretical Chemistry Accounts		1	1					2
Journal of Molecular Modeling		1	1					3
Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis		1						1
Journal of Cleaner Production			2					2
International Journal of Molecular Science			1	1				2
Applied Science			2		1			3
Journal of Molecular Graphics and Modelling			1				1	2
Computation			1	1	1			3
Organic and Biomolecular Chemistry			1					1
Structural Chemistry				1				1
Materials				2				2
Crystals				2				2
Journal of Computational Chemistry				1				1
Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly				2				2
Pharmaceuticals					1	1		2
Chemistry of Heterocyclic Compounds						1	1	2
	7	10	15	18	7	3	2	62

14. Wykaz uczestnictwa w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych.

-

15. Wykaz udziału w zespołach badawczych, realizujących projekty inne niż określone w pkt. II.9.

PO DOKTORACIE	
[1]	Wykonawca projektu „Jestem ZA wiedzą” realizowanego z funduszy UE w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój „Trzecia Misja Uczelni”. Projekt nr POWR.03.01.00-00-T117/18 (2019-2021).
[2]	Wykonawca projektu nr PPI/PRO/2019/1/00018, w ramach projektu międzynarodowej wymiany stypendialnej doktorantów i kadry akademickiej, współfinansowanego ze środków Unii Europejskiej w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój – POWER (2020).
[3]	Wykonawca projektu, w ramach międzynarodowej wymiany stypendialnej doktorantów i kadry akademickiej, współfinansowanego ze środków Unii Europejskiej w ramach Europejskiego Funduszu Społecznego Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój – POWER (2019).
[4]	Wykonawca projektu „Wakacje z matematyką” projekt fundacji m-banku (08.2018)

16. Wykaz uczestnictwa w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań, wnioski o przyznanie nagród naukowych, wnioski w innych konkursach mających charakter naukowy lub dydaktyczny.

-

III. WSPÓLPRACA Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

1. Wykaz dorobku technologicznego.

-

2. Współpraca z sektorem gospodarczym.

-

3. Wykaz uzyskanych praw własności przemysłowej, w tym uzyskanych patentów krajowych lub międzynarodowych.

PRZED DOKTORATEM

[1]	Łapczuk-Krygier A., Dresler E., Jasiński R., Kulesza R., Kącka A., Fiszer R. Sposób otrzymywania (E)-2-(4-dimetyloamino)-fenylo-1-cyjano-1-nitroetenu. Zgłoszenia patentowe PL 227270 Data pierwszeństwa: 2015-06-12 Data publikacji: 2016-12-19
-----	--

4. Wykaz wdrożonych technologii.

-

5. Wykaz wykonanych ekspertyz lub innych opracowań wykonanych na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców.

-

6. Wykaz udziału w zespołach eksperckich lub konkursowych.

-

7. Wykaz projektów artystycznych realizowanych ze środowiskami pozaartystycznymi.

-

IV. DANE NAUKOMETRYCZNE

Rodzaj wskaźnika	Przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora	Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora	Cały dorobek
Publikacje w czasopiśmie wyszczególnionych w bazie JCR	14	25	39
Sumaryczny Impact Factor	12.542	75.531	88.073
Liczba cytowań wg Scopus/Web of Science	-	-	574/455
Indeks Hirsha wg Scopus/Web of Science	-	-	15/14
Kierowanie projektami badawczymi	2	7	9

Udział w projektach badawczych	4	8	12
Aktywny udział w międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych jako prezentujący lub współautor – wystąpienia ustne	2	5	7
Aktywny udział w międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych jako prezentujący lub współautor – wystąpienia posterowe	9	19	28
Staże w zagranicznych i krajowych ośrodkach naukowych	3	3	6
Zgłoszenia patentowe	1	-	1
Monografie	1	1	2

Agnieszka Kępczyńska

 (podpis wnioskodawcy)