



**INSTYTUT FIZYKI MOLEKULARNEJ PAN
W POZNANIU**

**ZAKŁAD FIZYKI NISKICH TEMPERATUR
W ODOLANOWIE**

tel.: (62) 594-00-15 e-mail: trybula@ifmpan.poznan.pl

prof. dr hab. Zbigniew Trybula

Odolanów, 2 maja 2018

Recenzja

rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego

dr Joanny Aleksandry Kowalczuk

Recenzja rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego dr Joanny Aleksandry Kowalczuk została wykonana na podstawie przygotowanej przez Habilitantkę dokumentacji zawierającej następujące części:

1. Dane osobowe wraz z kopią dyplomu uzyskania stopnia doktora nauk fizycznych oraz osiągnięcia naukowe
2. Autoreferat
3. Szczegółowe informacje o osiągnięciach naukowych
4. Autoreferat w języku angielskim
5. Teksty artykułów naukowych stanowiące podstawę przewodu habilitacyjnego wraz z oświadczeniami współautorów

I. Informacje o Habilitantce

Pani dr Joanna Aleksandra Kowalczuk jest absolwentką Wyższej Szkoły Pedagogicznej im. T. Kotarbińskiego w Zielonej Górze. Studia zawodowe zakończyła obroną pracy licencjackiej z wynikiem bardzo dobrym w 1998 roku, a studia magisterskie ukończyła obroną pracy magisterskiej również z wynikiem bardzo dobrym na kierunku fizyka w roku 2000. W tym samym roku rozpoczęła studia doktoranckie w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu (IFM PAN) pod opieką Pani prof. dr hab. Jadwigi Tritt-Goc. Stopień doktora nauk fizycznych został Jej nadany przez Radę Naukową Instytutu Fizyki Molekularnej PAN w Poznaniu w 2005 roku na podstawie rozprawy „*Kinetyka powstawania warstwy żelowej hydroksypropylo - metylocelulozy badana metodą tomografii magnetyczno-*

rezonansowej”. Po uzyskaniu stopnia doktora była zatrudniona w IFM PAN w Środowiskowym Laboratorium Badań Radiospektroskopowych na stanowisku adiunkta (2005-2016), a od 2016 na stanowisku fizyka. W roku 2002 Habilitantka wzięła udział w międzynarodowej szkole *Polish-German Dialog Summer School* dla doktorantów w laboratorium profesora Franza Fujary na Politechnice w Darmstadt w Niemczech. Tam poznała nową, mało wówczas dostępną technikę pomiarową Fast Field Cycling Nuclear Magnetic Resonance (FFC NMR), która umożliwia rejestrację czasów relaksacji T_1 i T_2 spinów w funkcji pola magnetycznego. W roku 2005 odbyła krótki miesięczny staż naukowy w tym samym laboratorium prof. F. Fujary w Darmstadt, poznając technikę pomiaru dyfuzji molekuł w stałym, dużym gradiencie pola magnetycznego. Zdobyte podczas stażu doświadczenia pozwoliły Jej na kontynuowanie i poszerzenie badań nad materiałami żelowymi.

Habilitantka jest również absolwentką dwuletnich studiów podyplomowych w Wyższej Szkole Bankowej w Poznaniu na kierunku Zarządzanie Projektem Badawczym, które ukończyła w 2011 roku.

II. Ocena rozprawy habilitacyjnej

Rozprawę habilitacyjną pt. *„Dynamika molekularna i oddziaływania na granicy pomiędzy żelatorami polimerowymi i o małej masie molekularnej a rozpuszczalnikami w żelach molekularnych”* stanowi zbiór siedmiu monotematycznych prac opublikowanych w latach 2009-2017 w czasopismach z bazy Journal Citation Reports (JCR). Jedna z prac [H7] z 2017 roku jest pracą jednoautorską, w czterech pracach [H1, H2, H5, H6] Habilitantka jest pierwszym autorem, w dwóch [H3] i [H4] jest drugim autorem. Trzy prace mają impact factor $IF > 4$, trzy mieszczą się w przedziale $3 < IF < 4$ a praca [H7] ma $IF = 2,599$. Przedstawiona przez Habilitantkę dokumentacja zawiera rzetelną ocenę własnego wkładu do poszczególnych wieloautorskich prac stanowiących rozprawę habilitacyjną wraz z oświadczeniami współautorów. Nie mam wątpliwości, że Habilitantka miała wiodącą rolę w badaniach, których rezultatem są prace stanowiące rozprawę habilitacyjną.

Głównym celem cyklu prac rozprawy habilitacyjnej było określenie wpływu parametrów fizycznych rozpuszczalników na samoorganizację molekuł żelatorów o małej masie molekularnej - Low Molecular Weight Gelators (LMWGs) w żelach oraz zbadanie oddziaływań pomiędzy molekułami rozpuszczalników i żelatorów w otrzymanych żelach (prace H1, H3-H6), oraz określenie mechanizmów dyfuzji towarzyszących procesowi pęcznienia i żelowania polimeru hydroksypropylo metylocelulozy (HPMC) poddanemu działaniu wody a także zbadanie wpływu promieniowania mikrofalowego na ten proces (praca H2). Przedstawiony w rozprawie habilitacyjnej kierunek badań jest interesujący i ważny nie tylko z naukowego punktu widzenia, ale przede wszystkim ze względów aplikacyjnych. Badania nad materiałami stałymi mającymi zdolność do unieruchamiania

cieczy lub gazów w procesie żelowania mają duże znaczenie praktyczne w zapewnieniu komfortu i bezpieczeństwa ludzi oraz w ochronie środowiska naturalnego.

W swojej pracy habilitantka zastosowała wiele metod badawczych, które umożliwiły poznanie struktury żelu oraz oddziaływań pomiędzy molekułami stanowiącymi jego składniki. Głównie korzystała z technik spektroskopowych Jądrowego Rezonansu Magnetycznego: relaksometria NMR, mikroobrazowanie z kontrastami T_2 , ρ oraz dyfuzjometria NMR. Wykorzystała także inne techniki pomiarowe: mikroskopię polaryzacyjną, elektronową mikroskopię skaningową SEM, spektroskopię Ramana, spektroskopię w podczerwieni FT-IR, spektroskopia UV-Vis i spektroskopię fluorescencyjną.

Poniżej przedstawiam krótkie omówienie poszczególnych prac w kolejności ich ponumerowania od [H1] do [H7] (* oznaczono autora korespondencyjnego).

Publikacja [H1]

Kowalczyk, J.; Jarosz, S.; Tritt-Goc, J.*,

Characterization of Low Molecular-Weight Gelator Methyl-4,6-O-(p-nitrobenzylidene)- α -D-glucopyranoside Hydrogels and Water Diffusion in Their Networks,

Tetrahedron, **2009**, 65, 9801–9806,

(IF=3,219; cytowania: 19)

W pracy tej Habilitantka wykonała samodzielnie całą część doświadczalną i wykonała wszystkie próbki badawcze. Praca przedstawia wyniki badań właściwości termicznych jednego z trzech przedstawionych w rozprawie habilitacyjnej żelatora należącego do grupy żelatorów o małej masie molekularnej (LMWGs): metyl 4,6,-O-(p-nitrobenzylidyno)- α -D-glukopyranoza oznaczanego przez Habilitantkę skrótowo jako (G1), posiadającego niezwykłą zdolność żelowania zarówno wody jak również wybranych rozpuszczalników organicznych. Stwierdzono włóknistą strukturę tego żelatora podobną do tworzonej w wodzie przez pochodne celulozy HPMC. Zbadano zależność temperatury przejścia żel-zol T_{gs} (ang. *gel-sol*) od koncentracji badanego żelatora w hydrożelu (1.5, 2, 3, 4, and 5% [g/mL]) na zbudowanym przez Habilitantkę układzie pomiarowym i wyznaczono wartości energii aktywacji przejścia żel-zol.

Publikacja [H2]

Kowalczyk, J.*; Tritt-Goc, J.,

Effect of Microwave Irradiation on the Hydroxypropyl Methylcellulose Powder and its Hydrogel Studied by Magnetic Resonance Imaging,

Carbohydrate Polymers, **2011**, 83, Issue 1, 166–170,

(IF=3,628; cytowania: 4)

Praca ta stanowi kontynuację tematyki pracy doktorskiej Habilitantki. Przedstawiono w niej wyniki dyfuzji molekuł wody w 5% żelach utworzonych z żelatora hydroksypropylo metylocelulozy (HPMC). Pokazano destrukcyjny wpływ promieniowania mikrofalowego o mocy 160W oraz 320W na molekuły poprzez badanie wartości parametrów fizycznych: współczynników dyfuzji D , czasów relaksacji T_2 i gęstości protonów ρ molekuł rozpuszczalnika. Stwierdzono, że wraz ze wzrostem mocy promieniowania mikrofalowego, działającego na polimer polimer, gęstości protonów oraz współczynniki dyfuzji molekuł wody w żelu rosną, natomiast czasy relaksacji T_2 dla wody maleją. Autorzy pracy pokazali zrywanie wiązań wodorowych w czynniku żelującym na skutek napromieniowania mikrofalowego oraz zmiany dynamiki rozpuszczalnika wewnątrz sztywnej matrycy żelu. Praca ta wnosi znaczący wkład w poznanie mechanizmów dyfuzji roztworów wewnątrz polimerowych matryc, procesów pęcznienia i powstawania żelu, co jest ważne przy projektowaniu różnych układów żelujących mających zastosowania praktyczne.

Publikacja [H3]

Tritt-Goc, J.*; Kowalczyk, J.,

Diffusive Diffraction Phenomenon Observed by PGSE NMR Technique in a Sugar-Based Low-Molecular-Mass Gel,

Langmuir, **2012**, 28 (39), 14039-14044,

(IF=4,187; cytowania: 5)

Praca ta kontynuacją badań żelatora należącego do grupy żelatorów o małej masie molekularnej (LMWGs): metyl 4,6,-O-(p-nitrobenzylidyno)- α -D-glukopyranoza (G1) opisanego w pracy [H1]. Dotyczy ona analizy odkrytego w 2% organożelu zaobserwowanego „piku dyfrakcyjnego”. Dużą wartością tej pracy jest to, że autorzy po raz pierwszy z sukcesem zastosowali do analizy echa gradientowego dla rzeczywistego żelu dwufrakcyjny model opisujący dwa stany w jakich znajduje się rozpuszczalnik: swobodny i ograniczony. Zgodnie z tym modelem w zaniku echa gradientowego udział mają dwie odrębne frakcje molekuł rozpuszczalnika, frakcja swobodna (*free*) oraz frakcja ograniczona geometrycznie (*rest*). Pokazano, że udział obu frakcji jest porównywalny: (*frakcja swobodna*=0.51 oraz *frakcja ograniczona*=0.49).

Publikacja [H4]

Bielejewski, M.; Kowalczyk, J.; Kaszyńska, J.; Łapiński, A.; Luboradzki, R.; Demchuk, O.; Tritt-Goc, J.*,

Novel Supramolecular Organogels Based on a Hydrazide Derivative: Non-Polar Solvent-Assisted Self-Assembly, Selective Gelation Properties, Nanostructure, Solvent Dynamics,

Soft Matter, **2013**, Volume: 9 Issue: 31, 7501-7514,

(IF=4,151; cytowania: 15)

W pracy tej przedstawiono rezultaty badań żeli utworzonych z innego niż do tej pory badanego przez Habilitantkę żelatora należącego do grupy żelatorów o małej masie molekularnej (LMWGs): 4-(4-morfolinylo)-3-nitro-benzylidohydrazyd, oznaczonego jako (G2), oraz organicznych rozpuszczalników: benzeno, toluenu i p-ksylenu. Pokazano, że najbardziej stabilny termicznie żel tworzy (G2) z benzenem. temperatura przejścia żol-żel

wynosi 304K, podczas gdy żel utworzony z (G2) i p-ksylenu jest stabilny poniżej temperatury 295K. Stwierdzono, że rozpuszczalnik ma zasadniczy wpływ na proces tworzenia się sztywnej matrycy żelu, jednak po jego uformowaniu się nie odgrywa już żadnej istotnej roli. Jednak dzięki zastosowaniu techniki FFC NMR w zakresie niskich częstości poniżej 10^6 Hz zaobserwowano dyspersję czasów relaksacji T_1 wskazującą na oddziaływanie pomiędzy molekułami rozpuszczalników i żelatora w stabilnym żelu. Zaobserwowanie tego słabego oddziaływania uważam za duże osiągnięcie.

Publikacja [H5]

Kowalczuk, J.; Bielejewski, M.; Łapiński, A.; Luboradzki, R.; Tritt-Goc, J.*,

The Solvent-Gelator Interaction as the Origin of Different Diffusivity Behavior of Diols in Gels Formed with Sugar-Based Low-Molecular-Mass Gelator,

J. Phys. Chem. B, **2014**, 118, 4005–4015,

(IF=3,302; cytowania: 13)

Praca ta dotyczy badań ostatniego z trzech badanych przez Habilitantkę żelatorów o małej masie molekularnej (LMWGs): 4,6,4',6'-O-tereptylideno-bis (metylo- α -D-glukopyranoza) oznaczonego jako (G3). Jest to ciekawy żelator, ponieważ jest to selektywny żelator potrafiący przeprowadzać w stan żelu tylko rozpuszczalniki będące pochodnymi gliceryny. Za najciekawsze osiągnięcie przedstawione w tej pracy uważam odkrycie nietypowego oddziaływania pomiędzy żelatorem (G3) i rozpuszczalnikiem pochodnej gliceryny – 1,3-propanediolu. Możliwe to było dzięki zbadaniu dynamiki molekularnej rozpuszczalnika. Znajomość dynamiki molekularnej rozpuszczalnika pozwoliła na wy tłumaczenie anomalnego zachowanie się współczynnika dyfuzji pochodnej gliceryny – 1,3-propanediolu w matrycy żelu w funkcji koncentracji żelatora G3 w układzie.

Publikacja [H6]

Kowalczuk, J.* ; Rachocki, A.; Bielejewski, M.; Tritt-Goc, J.,

Effect of gel matrix confinement on the solvent dynamics in supramolecular gels,

Journal of Colloid and Interface Science, **2016**, 472, 60–68,

(IF=4,233; cytowania: 5)

Publikacja ta jest jedną z serii prac H1, H3, H6, H7 dotyczących badań żelatora należącego do grupy żelatorów o małej masie molekularnej (LMWGs): metyl 4,6,-O-(p-nitrobenzylidyno)- α -D-glukopyranoza oznaczonego jako (G1), które Habilitantka rozpoczęła w 2009 roku i opublikowała w pracy H1. W pracy H6 zaobserwowano ciekawe rezultaty dotyczące organożeli utworzonych z żelatora G1 oraz rozpuszczalników: 1,3-propanediol (PG) i 1-butanol (BU). Wystąpiły duże różnice w oddziaływaniach między żelatorem a rozpuszczalnikami (PG) i (BU) pomimo bardzo zbliżonej budowy chemicznej stosowanych rozpuszczalników. Z powodzeniem po raz pierwszy zastosowano do analizy pomiarów relaksometrii FFC NMR model *RMTD* (*Reorientation mediated by translational displacements*), co uważam za duże osiągnięcie. Pozwoliło to bowiem na pokazanie różnic w budowie powierzchni sztywnych matryc organożeli z dwoma różnymi rozpuszczalnikami. Analiza ta była potwierdzona uzupełniającymi metodami badawczymi, takimi jak dyfuzjometria NMR oraz mikroskopia polaryzacyjna.

Publikacja [H7]

Kowalczuk, J.*

The structural parameters of rigid matrix of saccharide-based gel described by short and long diffusion regime analysis,

Journal of Materials Science, **2017**, 52(18), 11101-11108,

(IF=2,599; cytowania: 0)

Ostatnia praca wchodząca w skład rozprawy habilitacyjnej jest pracą samodzielną Habilitantki, wskazującą na jej dużą samodzielność i dojrzałość w prowadzeniu badań naukowych. Dotyczy ona żelu utworzonego z żelatora metyl 4,6,-O-(p-nitrobenzylidyno)- α -D-glukopyranoza oznaczonego jako(G1) i toluenu. Habilitantka przedstawiła proces obliczenia parametrów strukturalnych materiału porowatego na podstawie analizy pomiarów współczynników dyfuzji toluenu uwiecznionego w matrycy żelatora G1. Wyzaczyła wielkość porów występujących w sztywnej matrycy żelu. Dane te dobrze zgadzają się z danymi literaturowymi.

Podsumowując tę część mojej oceny stwierdzam, że zbiór siedmiu prac przedstawionych w tej rozprawie habilitacyjnej stanowi spójną całość i w mojej ocenie może być podstawą rozprawy habilitacyjnej.

III. Ocena dorobku naukowego, działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Pani dr Joanna Aleksandra Kowalczuk rozpoczęła swoją działalność naukową w roku 2000 pod fachową opieką Pani prof. dr hab. Jadwigi Tritt-Goc najpierw na Studium Doktoranckim w IFM PAN, a po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych w Środowiskowym Laboratorium Badań Radiospektroskopowych IFM PAN. W pierwszych latach działalności naukowej Jej zainteresowania dotyczyły zagadnień związanych z procesem dyfuzji rozpuszczalników odpowiedzialnym za procesy rozpadu leków, z wykorzystaniem głównie metody Jądrowego Rezonansu Magnetycznego w tym mikroobrazowania. Zwieńczeniem tych badań była obrona pracy doktorskiej w 2005 roku. Po tym okresie Habilitantka kontynuowała i rozwinęła swoje zainteresowania na badania procesów dyfuzyjnych zachodzących w żelach powstałych z polimeru *HPMC* oraz żelatorów o małej masie molekularnej *LMWGs* poddanych działaniu różnych rozpuszczalników. Wyniki swoich badań po 2005 roku przedstawiła w recenzowanej rozprawie habilitacyjnej.

Rezultaty badań naukowych dr Joanny Aleksandry Kowalczuk zostały zauważone w środowisku naukowym. Habilitantka jest autorem łącznie 20 artykułów naukowych, z czego 16 w bazie Web of Science (18 w bazie Scopus). Ma akceptowalny indeks Hirscha równy 10. Jej prace były cytowane 173 razy (150 bez autocytowań) – dane z 1 maja 2018 roku. O jej aktywności naukowej świadczy też udział w 27. naukowych konferencjach międzynarodowych, podczas których prezentowała rezultaty swoich badań głównie w postaci posterów, oraz udział w 10. krajowych konferencjach naukowych (8 wykładów i 2 postery). Jej poster prezentowany w 2017 roku na międzynarodowej konferencji AMPERE XXIV NMR School w Zakopanem, został nagrodzony w konkursie posterów zajmując I miejsce. Habilitantka nawiązała szeroką współpracę z siedmioma krajowymi ośrodkami naukowymi. Zaowocowało to wspólnymi pracami dotyczącymi: destrukcyjnego wpływu wody na drewniane materiały budowlane, wpływu konserwantów powstałych na bazie

silikonu na odporność drewna, a także zbadania dynamiki wody w rozwijających się pędach świerka pospolitego.

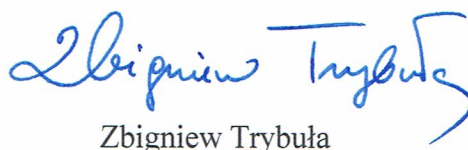
Dr Joanna Aleksandra Kowalczuk była głównym wykonawcą w dwóch projektach badawczych NCN w latach 2007-2009 oraz 2011-2014. Obecnie realizuje projekt badawczy Miniatura 1, którego jest kierownikiem, oraz jest głównym wykonawcą w projekcie finansowanym przez MNiSW „*Narodowy Program Rozwoju Humanistyki*” – moduł 2b – *Rozwój: Dziedzictwo kulturowe - poszukiwanie nowoczesnych środków i metod konserwacji drewna zabytkowego*” w ramach konsorcjum w okresie 2016-2019. Była ponadto recenzentem dwóch prac w Journal of Colloid and Interface Science.

Dorobek Habilitantki w zakresie dydaktyki jest raczej skromny, ale zadawalający. Była Ona opiekunem pięciu studentów podczas praktyk studenckich.

W działalności organizacyjnej dr Joanna Kowalczuk była zaangażowana w przygotowaniach i przebiegu międzynarodowej konferencji naukowej RAMIS w 2005 roku (udział w pracy komitetu organizacyjnego) i 2007 roku (sekretarz konferencji). Ponadto brała udział w organizacji Poznańskiego Sympozjum Polimerowego w 2008 i 2011 roku. W kadencji 2010-2014 była członkiem Rady Naukowej IFM PAN.

IV. Konkluzja

Podsumowując moją ocenę stwierdzam, że dr Joanna Aleksandra Kowalczuk wykazuje dużą samodzielność i dojrzałość w prowadzeniu badań naukowych i jest wybitnym specjalistą i znawcą nowoczesnych technik Jądrowego Rezonansu Magnetycznego: relaksometrii NMR, mikroobrazowania z kontrastami T_2 , ρ oraz dyfuzjometrii NMR. Z dokonanej oceny wynika, że rozprawa habilitacyjna dr Joanny Aleksandry Kowalczuk, stanowiąca zbiór siedmiu opublikowanych prac, **wnosi istotny wkład** do lepszego zrozumienia mechanizmów dotyczących procesów tworzenia się żeli, dyfuzji rozpuszczalników w matrycach żelowych i oddziaływań zachodzących pomiędzy molekułami rozpuszczalnika i żelatora. Biorąc to pod uwagę oraz dokonania Habilitantki w dziedzinie działalności organizacyjnej i dydaktycznej, **stwierdzam, że dr Joanna Aleksandra Kowalczuk spełnia ustawowe warunki stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego i wnioskuję o dopuszczenie Jej do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.**



Zbigniew Trybuła