

Prof. dr hab. inż. Janusz Stangret  
Katedra Chemii Fizycznej  
Wydział Chemiczny  
Politechnika Gdańska  
ul. G. Narutowicza 11/12  
80-233 Gdańsk

Gdańsk, 10.03.2014

**Recenzja dorobku naukowego i dydaktycznego pani dr inż. Iwony Kowalczyk oraz jej  
rozprawy habilitacyjnej zatytułowanej  
*„Synteza, badania spektroskopowe i strukturalne aminokarboksybetain i ich pochodnych”***

**Krótką charakterystyką sylwetki Kandydatki**

Habilitantka studiowała na Politechnice Poznańskiej na Wydziale Technologii Chemicznej, otrzymując w roku 1990 tytuł zawodowy magistra inżynierii chemii. W roku 1999 uzyskała na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. A. Mickiewicza w Poznaniu stopień naukowy doktora nauk chemicznych za pracę „Wiązanie wodorowe w kompleksach pirydynobetain”, którą wykonała pod kierunkiem Prof. Mirosława Szafrana. Po doktoracie pracuje jako adiunkt w Zakładzie Fizycznej Chemii Organicznej na Wydziale Chemii UAM. W latach 2010 i 2012 dr inż. Iwona Kowalczyk odbywała krótkoterminowe staże naukowe w Chinach.

**Ocena dorobku naukowego stanowiącego przedmiot rozprawy habilitacyjnej**

Podstawą habilitacji jest seria monotematycznych prac zatytułowana: „Synteza, badania spektroskopowe i strukturalne aminokarboksybetain i ich pochodnych”. Składa się ona z 13 oryginalnych artykułów opublikowanych w czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym, takich jak: J. Mol. Struct. (11 pozycji), Arkivoc (1 pozycja) oraz Molecules (1 pozycja). Prace ukazały się w latach 2005 – 2012. Trzy spośród nich są publikacjami monoautorskimi. Na podstawie oświadczeń współautorów (podających procentowy udział własny wraz z określeniem indywidualnego wkładu), a także na podstawie własnej oceny dr inż. Iwony Kowalczyk, wynika jednoznacznie inspirujący i wiodący udział Habilitantki w serii omawianych prac. Występująca kolejność autorów w części publikacji współautorskich oraz wskazany w nich autor do korespondencji już niekoniecznie sugerują wprost powyższy wniosek. Sumaryczny impact factor (IF) całego cyklu prac wynosi 21.21

(średni IF na pracę to 1.63). Łączna liczba punktów MNiSW wynosi 268 (średnia liczba punktów MNiSW na pracę to 21).

Uzupełnieniem recenzowanego cyklu publikacji jest dołączony „Autoreferat”, który stanowi przewodnik po pracach przedstawionych jako rozprawa habilitacyjna i jest zakończony podsumowaniem. Obecność tego dość obszernego opracowania jest bardzo cenna dla recenzenta, gdyż wskazuje na myśl przewodnią całego cyklu. W szczególności, uświadamia doniosłe znaczenie podjętej tematyki badawczej a także zawiera informacje dotyczące dalszych, moim zdaniem niezwykle ciekawych i potencjalnie bardzo wartościowych ze względu na możliwość wykorzystania w mikrobiologii i medycynie, zamierzeń badawczych.

Obiektem badań Habilitantki były betainy, związki określane jako jony obojnacze, występujące naturalnie w układach biologicznych, o ciekawych właściwościach, różnorodnych funkcjach pełnionych w przyrodzie i zastosowaniach przemysłowych, a także o możliwościach wykorzystania ich jako środków przeciwdrobnoustrojowych. Założeniem podjętych badań było otrzymanie i określenie właściwości betain o zróżnicowanej budowie i strukturze, począwszy od betain aminopirydyniowych poprzez betainy ftalimidowe, betainy alifatyczne oraz podwójne betainy.

Celem naukowym badań ujętych w cyklu prac była synteza nowych karboksybetain oraz określenie ich struktury, zbadanie oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych, określenie wpływu wiązań wodorowych na struktury otrzymanych związków, analiza geometrii wiązań wodorowych i zbadanie właściwości spektroskopowych badanych związków. Badania zostały wykonane przy wykorzystaniu pomiarów rentgenostrukturalnych, spektroskopii w podczerwieni, spektroskopii Ramana oraz magnetycznego rezonansu jądrowego ( $^1\text{H}$  i  $^{13}\text{C}$  NMR). Badania eksperymentalne zostały wsparte obliczeniami kwantowo-chemicznymi.

Osiągnięcia dr inż. Iwona Kowalczyk wynikające z przeprowadzonych badań można rozpatrywać w trzech grupach tematycznych:

- 1) Oryginalnych metod otrzymywania szeregu nowych aminopirydyniowych betain i ich pochodnych oraz modyfikacji opisanych wcześniej syntez.
- 2) Określenia struktury krystalograficznej otrzymanych betain i ich pochodnych. Między innymi, po raz pierwszy w literaturze światowej zostały opisane struktury 8 związków, których struktury krystalograficzne zostały wpisane do bazy danych struktur związków organicznych (CCDC).



- 3) Uzyskania charakterystyki oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych badanych związków w fazie skondensowanej i w fazie gazowej przy pomocy metod spektroskopii oscylacyjnej i magnetycznego rezonansu jądrowego oraz obliczeń teoretycznych metodą DFT. Istotnym osiągnięciem jest jednoznaczne przypisanie badanym związkom drgań oscylacyjnych w oparciu o obliczone kwantowo-chemicznie częstości drgań harmoniczných, poddanych skalowaniu zgodnie ze zmierzonymi częstościami eksperymentalnymi uzyskanymi w fazie stałej.

Zastosowanie szeregu metod fizykochemicznych i obliczeń teoretycznych pozwoliły Habilitantce na sformułowanie szczegółowych wniosków dotyczących właściwości strukturalnych i spektroskopowych badanych układów. Wyniki wskazują na fundamentalną rolę wiązań wodorowych i oddziaływań elektrostatycznych w strukturze pochodnych aminokarboksybetain. Zasadniczą rolę w tym względzie pełni obecność wody hydratacyjnej w kryształach.

Uzyskane przez dr inż. Iwonę Kowalczyk wyniki są spójne, dobrze udokumentowane, i budzą zaufanie. Prace współautorskie są wsparte dużym doświadczeniem macierzystego Zespołu badawczego. Prace monoautorskie nie pozostawiają natomiast wątpliwości, iż Autorka posiada umiejętność syntezy związków, doskonale wykorzystuje skomplikowane techniki eksperymentalne, interpretuje wyniki z wykorzystaniem metod teoretycznych, a przede wszystkim ma wizję i koncepcję naukową – cechy samodzielnego pracownika naukowego.

Podsumowując tę część mojej recenzji chciałbym podkreślić celowość wyboru tematu rozprawy. Autorka dostarczyła dużo nowych, bardzo dokładnych danych strukturalnych oraz spektroskopowych badanych układów, ważnych w biologii i potencjalnie użytecznych w mikrobiologii i medycynie, a także przedstawiła wiele wniosków szczegółowych dotyczących przyczyn stwierdzonych właściwości. Materiał badawczy jest na tyle bogaty, iż prosi się o próbę uogólnienia obserwacji w ramach monograficznego opracowania. Uważam, że przedłożona do recenzji rozprawa habilitacyjna jest wartościowa i zawiera wiele elementów nowości naukowej. Uzyskane rezultaty i opracowane struktury stanowią oryginalny i ważny wkład w zakresie chemii strukturalnej, fizycznej i organicznej. Stwierdzam zatem, że przedstawiona rozprawa habilitacyjna może stanowić podstawę do ubiegania się przez dr inż. Iwonę Kowalczyk o nadanie Jej stopnia doktora habilitowanego.

## Ogólny dorobek naukowy

Na całkowity dorobek naukowy dr inż. Iwony Kowalczyk składają się 57 publikacje, z których 36 znajduje się na tzw. liście filadelfijskiej. Przed uzyskaniem stopnia doktora były to 4 publikacje (wszystkie z listy filadelfijskiej). Liczba komunikatów na konferencjach krajowych i międzynarodowych równa jest 60, w tym 7 przed uzyskaniem stopnia doktora. Sumaryczna wartość współczynnika oddziaływania (*Impact Factor* IF) wynosi 53.879, co daje wartość 1.497 w przeliczeniu na jedną publikację. Łączna liczba cytowań prac z udziałem dr inż. Iwony Kowalczyk wynosi 193 (wszystkich cytowań jest 261), a tzw. indeks Hirscha wynosi 9. W podsumowaniu można stwierdzić, że liczbowo dorobek naukowy jest znaczący, lecz w przeliczeniu na jedną publikację współczynnik oddziaływania prac (IF) nie jest wysoki w grupie nauk chemicznych. Relatywnie wysoka jest jednak liczba cytowań i wynikająca stąd wartość indeksu Hirscha. Ten ostatni wniosek świadczy pozytywnie o aktualności tematyki badawczej jak i o wartości uzyskanych wyników.

Badania naukowe Kandydatki nie dotyczące tematyki habilitacji, prowadzone po doktoracie, polegają na syntezie nowych związków o potencjalnej aktywności przeciwdrobnoustrojowej i terapeutycznej, a także na dostarczeniu charakterystyki fizykochemicznej i spektroskopowej tych związków wraz z podaniem ich struktury. W skład badanych związków wchodzi, m.in. pojedyncze, podwójne, potrójne i poczwórne czwartorzędowe sole alkiloamoniowe, cykliczne czwartorzędowe sole amoniowe, poliaminy, sole ftalimidoamoniowe, pochodne alkilotetrachloroftalimidowe, betainy i ich pochodne oraz koniugaty steroidowo-alkiloamoniowe. Główne osiągnięcia Habilitantki w tym zakresie sprowadzają się do syntezy nowych związków, szczególnie ważnych ze względu na bardzo dobre właściwości przeciwdrobnoustrojowe oraz wysoką aktywność powierzchniową. W przypadku niektórych grup związków udało się skorelować aktywność przeciwdrobnoustrojową z parametrami budowy chemicznej i struktury cząsteczek.

W najbliższej przyszłości Kandydatka zamierza kontynuować badania betain, w aspekcie wykorzystania ich właściwości przeciwdrobnoustrojowych. Związki te mają służyć modyfikacji półprzewodnikowych nanokryształów o właściwościach tzw. kropek kwantowych, pod kątem ich wykorzystania w mikrobiologii i medycynie. Z kropkami kwantowymi wiąże się, między innymi, duże nadzieje w dziedzinie technologii postaci leku, umożliwiającej dokładniejsze dawkowanie i precyzyjne sterowanie lekiem przy doprowadzaniu go do ogniska choroby.



## **Inne formy aktywności naukowej oraz działalność dydaktyczna i organizacyjna Kandydatki**

Istotnym elementem oceny Kandydatki do stopnia dr habilitowanego jest jej udział w realizacji 11 badań naukowych w ramach umów i projektów badawczych z partnerami krajowymi i zagranicznymi (Projekty Polsko-Chińskie) oraz grantach KBN jako wykonawca. Dr inż. Iwona Kowalczyk prowadzi także ożywioną współpracę naukową z zespołami na Wydziale Biotechnologii i Nauk o Żywności na Politechnice Łódzkiej, w Instytucie Ciężkiej Syntezy Organicznej Blachownia w Kędzierzynie Koźlu, a także z na Uniwersytecie Huazhong w Wuhan, Chiny. Innym świadectwem aktywności naukowej Habilitantki jest recenzowanie prac dla czasopism znajdujących się na tzw. „liście filadelfijskiej”, takich jak: *Spectrochim. Acta Part A i B*, *J. Mol. Struct.*, *Spectr. Letters* oraz *Molecules*. Powierzenie recenzji pod kątem publikacji prac w czasopismach świadczy o tym, że jest się dostrzeganym w świecie naukowym.

W pracy dydaktycznej dr inż. Iwona Kowalczyk może wykazać się osiągnięciami z racji zatrudnienia na stanowisku adiunkta. Prowadziła i prowadzi liczne zajęcia dla studentów różnych lat, dla kierunku Hydrologii, Ochrony Środowiska, Studiów Zawodowych, Biologii oraz Chemii, a także na studiach podyplomowych dla nauczycieli. Są to przede wszystkim ćwiczenia laboratoryjne różnego typu oraz ćwiczenia specjalistyczne z metod spektroskopowych oraz chemii sądowej. Kandydatka była także organizatorką 30-godzinnej pracowni sądowej dla studentów IV roku chemii i jest współautorką skryptu „Chemia Sądowa”, Wielkopolska Biblioteka Cyfrowa, Poznań 2013. Habilitantka była opiekunką naukowo-dydaktyczną 2 prac licencjackich i 14 prac magisterskich w Pracowni Chemii Mikrobiocydów oraz sprawowała opiekę w jednym przewodzie doktorskim. Za swoją działalność dydaktyczną uzyskała w 2013 roku Nagrodę Rektora UAM III stopnia. Zdobyte doświadczenie dydaktyczne jest niewątpliwie wystarczające do realizacji zadań samodzielnego pracownika naukowego.

Kontakt z dydaktyką nie kończy się na prowadzeniu zajęć kursowych oraz wymienionej już wyżej aktywności Kandydatki. Była ona także zaangażowana w prowadzenie zajęć dla szkół średnich w ramach „Pracowni Chemicznej”, uczestniczyła w zorganizowaniu Drzwi Otwartych dla uczniów szkół średnich oraz brała udział w zajęciach dla młodzieży szkół średnich i uczestników Olimpiad Chemicznych. Dr inż. Iwona Kowalska nie stroni także od działalności organizacyjnej na rzecz Uczelni. Dwukrotnie była Członkiem

Wydziałowej Komisji Rekrutacyjnej, opiekunem roku Chemii oraz Chemii Środowiska. Ma na swoim koncie współudział w organizowaniu sympozjum naukowego.

### **Podsumowanie**

Po dokonaniu oceny całości osiągnięć badawczych dr inż. Iwony Kowalskiej, a w szczególności tych, które wchodzą w zakres rozprawy habilitacyjnej, stwierdzam, że są one znaczące i oceniam je pozytywnie. Świadczą one o dojrzałości naukowej Kandydatki i stanowią dobrą podstawę do rozwijania dalszej, samodzielnej działalności naukowej. Wysoko oceniam także dydaktyczną i organizacyjną działalność Habilitantki.

Uważam, że dr inż. Iwona Kowalska spełnia wszelkie kryteria stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego, zgodnie z Ustawą z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595, z późniejszymi zmianami). Wnoszę, zatem, o dopuszczenie dr inż. Iwony Kowalskiej do dalszych etapów postępowania związanego z nadaniem Jej stopnia naukowego doktora habilitowanego.

