

Katowice, 28 stycznia 2022 r.

prof. dr hab. Michał Daszykowski
Instytut Chemii
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Uniwersytet Śląski
ul. Szkolna 9
40-006 Katowice
tel.: 32 359 11 28
e-mail: michal.daszykowski@us.edu.pl
ORCID: 0000-0003-0275-2751

Ocena całokształtu dorobku Pana dra Tomasza Staszewskiego
i Jego osiągnięcia naukowego pt. *„Teoria i symulacje układów zawierających łańcuchy
przyłączone do powierzchni ciał stałych i nanocząstek”*, będącego podstawą wszczęcia
postępowania habilitacyjnego

Pan dr Tomasz Staszewski w 2003 roku uzyskał dyplom magistra chemii na Wydziale Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, a w 2008 roku stopień naukowy doktora nauk chemicznych. W 2002 roku rozpoczął pracę na stanowisku inżynierijno-technicznym w Zakładzie Modelowania Procesów Fizykochemicznych na Wydziale Chemii, Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie. Od października 2003 roku do momentu uzyskania stopnia naukowego doktora, był zatrudniony na stanowisku asystenta, a następnie na stanowisku adiunkta i na tym stanowisku pracuje nieprzerwanie do dnia dzisiejszego.

Podstawą habilitacji jest cykl aż 19 artykułów, które zostały opublikowane w okresie dziewięciu lat (tj. od 2011 do 2020 roku). Ukazały się one w recenzowanych czasopismach cieszących się dość dużym prestiżem w środowisku. O randze tychże czasopism świadczy przede wszystkim nadany im współczynnik oddziaływania, który w przypadku większości z nich jest bardzo dobry. Dodatkowym atutem jest relatywnie mała liczba współautorów artykułów, co automatycznie zwiększa konieczny nakład pracy i zarazem świadczy o proporcjonalnie większym zaangażowaniu habilitanta. Jeden artykuł z cyklu habilitacyjnego opublikował samodzielnie. Sumaryczny współczynnik oddziaływania czasopism, w których zamieścił artykuły z cyklu habilitacyjnego wynosi 55,974 co średnio daje 2,946 na artykuł. W autoreferacie, w części przedstawiającej wykaz publikacji włączonych do cyklu habilitacyjnego, w przypadku każdej pozycji znajdujemy opis wkładu poszczególnych współautorów w powstanie danej publikacji ujmujący w bardzo syntetyczny sposób pełnią przez nich rolę. Pogłębiona analiza treści złożonych oświadczeń wkładów współautorów pozwala stwierdzić, że rola Pana dra Tomasza Staszewskiego była wiodąca, a bez jego zaangażowania publikacje albo by nie powstały albo ich wartość merytoryczna byłaby znacznie

niższa. Brał on aktywny udział w procesie planowania i realizowania badań, dobierał do badań układy, opracowywał koncepcje ich modelowania, przeprowadzał różnego rodzaju symulacje oraz obliczenia, analizował wyniki, a także aktywnie przygotowywał publikacje i uczestniczył w całym procesie publikacyjnym. Niewątpliwie dostrzegam jego duży wkład merytoryczny. Artykuły powstały w ramach wewnętrznej współpracy członków zespołu, a dwa z nich również uwzględniają autorów z instytucji zagranicznych.

W autoreferacie Pan dr Tomasz Staszewski podsumowuje swoje osiągnięcie naukowe, na które składa się teoretyczny opis układów złożonych z określonej powierzchni z dołączonymi do niej cząsteczkami o układzie łańcuchów z uwzględnieniem badania wpływu wybranych parametrów i procesu samoorganizacji nanocząstek. Obrany przez niego problem badawczy ma duże znaczenie dla tych obszarów, w których poznawanie i zrozumienie natury oddziaływań pomiędzy związanymi na powierzchni łańcuchami, a pozostałymi elementami badanego układu jest fundamentalne. W szczególności, zagadnienia modelowania oddziaływań są przedmiotem zainteresowania naukowców prowadzących badania koloidów, rozwiązujących zagadnienia nanotechnologiczne, projektujących procesy smarowania, poszukujących nowe sposoby dostarczania leków, ulepszających metody skutecznego wiązania wybranych enzymów czy usprawniających procesy rozdzielania chromatograficznego. Niewątpliwie istotnym wkładem do rozwoju dyscypliny i wsparciem dla realizowanych badań jest możliwość modelowania określonych zjawisk i poznawanie ich natury niezależnie od prowadzonych eksperymentów laboratoryjnych. Uzyskane wyniki w toku prowadzonych symulacji dostarczają wiedzy wspierającej realizację eksperymentu zarazem informując o jego przewidywanym wyniku i w wielu przypadkach wskazują nam interesujące kierunki poszukiwań. Jedną z kluczowych ról jakie odgrywa współczesna chemia jest dostarczanie nowych materiałów o pożądanych własnościach, których efektywne projektowanie wymaga stosowania zaawansowanych metod modelowania. Z drugiej strony, natura badanych zjawisk nakłada konieczność uwzględnienia odmiennych warunków brzegowych, uwzględnienia określonych wkładów interakcji czy czynników co wprost przekłada się na zwiększenie stopnia złożoności konstruowanego modelu i przysparza trudności obliczeniowych. Stąd w rozważaniach teoretycznych, których zasadniczą część stanowi sam proces modelowania, bardzo pożądaną umiejętnością jest dostrzeganie czynników o istotnym znaczeniu dla badanego układu i ich poprawne opisanie stosując adekwatny aparat matematyczny. Pomimo dużej dostępności wielu technik obliczeniowych, w tym gotowych pakietów, a także będących w zasięgu ręki relatywnie dużych możliwości obliczeniowych, wcale nie jest to zadanie proste gdyż wymaga znajomości zaawansowanej matematyki, szerokiej wiedzy oraz umiejętności programowania. Te wyjątkowe cechy i umiejętności posiada Pan dr Tomasz Staszewski, czego potwierdzeniem jest jego osiągnięcie naukowe. Elementy, które się na nie składają, stanowią istotny wkład do rozwoju dyscypliny, gdyż przedstawiają oryginalne rozwiązania i potwierdzają nowe hipotezy badawcze lub ugruntowują istniejący stan wiedzy. W tym miejscu należy nadmienić, że w autoreferacie z dużą skrupulatnością autor odnotował wszystkie najważniejsze wnioski, które są efektem przeprowadzonych badań omawianych w poszczególnych publikacjach cyklu habilitacyjnego. Zważywszy na fakt formuły udostępnienia autoreferatu w otwartym dostępie nie widzę potrzeby aby po raz kolejny je w całości przywoływać. Stąd ograniczę swój komentarz jedynie do najważniejszych w mojej ocenie elementów. Teoria funkcjonu gęstości,

której przydatność habilitant wnikliwie testuje, służy do oceny istniejących oddziaływań w układach zawierających modyfikowane chemicznie powierzchnie z przytwierdzonymi łańcuchami polimerowymi i określone płyny. Tego typu rozważania zostały przeprowadzone z zamiarem pogłębionego poznania procesu adsorpcji płynów nadkrytycznych, procesu adsorpcji w roztworach binarnych, adsorpcji na chemicznie związanych fazach z różnymi grupami funkcyjnymi, procesu rozdzielu chromatograficznego na modyfikowanych fazach stacjonarnych, adsorpcji na związanych warstwach poliamfolitów oraz badań struktury warstwy powierzchniowej. Wyniki dla tej serii badań zostały szczegółowo omówione w publikacjach H1-H10. Habilitant wskazuje w nich, że uzyskanie równowagi w tego typu układach fazowych jest wypadkową efektów entropowych i entalpowych, które obserwuje się w fazie powierzchniowej i w płynie objętościowym. Nie jest zatem możliwe przewidzenie struktury związanej fazy w określonym układzie, a przeprowadzone przez niego badania miały charakter wyłącznie jakościowy. Badając układy zawierające płyn nadkrytyczny (artykuł H1) w rozważaniach uwzględniono dwa rodzaje powierzchni, a następnie przeprowadzono systematyczną analizę wpływu wybranych parametrów (gęstość pokrycia, długość przyłączonych łańcuchów i siła ich oddziaływania z powierzchnią) na proces adsorpcji, strukturę fazy powierzchniowej i selektywność. Ustalono, że mechanizm adsorpcji zależy od rozmiaru i kształtu cząsteczek płynu, a także, zaobserwowano zjawisko adsorpcji pierwotnej na podłożu oraz adsorpcji wtórnej wewnątrz łańcuchów polimeru i trzeciorzędowej na ich krawędziach. W publikacjach H2, H3 i H4 znajdziemy wyniki badań dotyczące adsorpcji z roztworów binarnych. Zauważono, że skład w okolicy powierzchni przede wszystkim zależy od typu roztworu. Dla roztworów organicznych ich cząsteczki wnikają do warstwy polimeru podobnie, podczas gdy w przypadku roztworów wodnych, ich wodny składnik nie wnika do wnętrza fazy związanej. Wraz ze wzrostem udziału składnika organicznego, w coraz większym stopniu wzbogaca się jego udział w związanej fazie. W pracach H3 i H4 zwrócono uwagę na zmiany w proporcji składników binarnego roztworu w zależności od modyfikowania określonych parametrów. W przypadku charakteryzowanego procesu adsorpcji oligomerów z monomerycznego rozpuszczalnika ustalono, że kształt izotermy adsorpcji nadmiarowej w głównej mierze zależy od wagi parametrów opisujących oddziaływanie przyciągające. Jednocześnie wyniki symulacji okazały się być w dużej mierze zbieżne z danymi literaturowymi. Ponadto, dokonano rozwinięcia stosowanego podejścia do przypadku łańcuchów o dwóch typach segmentów, z których jeden miał własności wiążące (publikacja H5). Tak zaplanowane badania pozwoliły ustalić, że drugi łańcuch z grupą przyciągającą ma wpływ na adsorpcję i budowę warstwy adsorpcyjnej, co znajduje także potwierdzenie w wynikach eksperymentalnych, które zostały opublikowane w literaturze poświęconej temu zagadnieniu. Dodatkowo, wskazano możliwe kierunki projektowania takich warstw adsorpcyjnych pod kątem zwiększenia ich efektywności w procesach rozdzielu. W szczególności, wzrost efektywności adsorpcji można zaobserwować gdy zostaną uwzględnione łańcuchy z przyciągającymi fragmentami umiejscowionymi obok bloków wiążących. Teoria funkcjonu gęstości została również uzupełniona przez habilitanta, a następnie po raz pierwszy wykorzystana do modelowania procesu retencji dla układu uwzględniającego chemicznie związaną fazę stacjonarną i cząstki kuliste lub liniowe (publikacja H6). Kolejnym istotnym zjawiskiem, które zostało słabo zbadane od strony teoretycznej była adsorpcja jonów na nośniku zmodyfikowanym kopolimerami (publikacja

H10). W tym celu dokonano modyfikacji metody, włączając inne potencjały oddziaływań (oddziaływania Coulomba). W badaniach habilitant uwzględnił szereg czynników oraz okoliczności, które wpływają na proces adsorpcji jonów. Uzyskane obserwacje i wnioski szczegółowo wymienił na stronach 14 oraz 15 autoreferatu. W artykule H7 wykazano wpływ gęstości płynu na przestrzenne ułożenie łańcuchów jednocześnie uzyskując interesujące wyniki modelowania w przypadku płynów w stanie nadkrytycznym. Podobnie jak wcześniej, pod uwagę brano bardzo szeroki zbiór istotnych z punktu widzenia badanego procesu czynników. Praca H9 uwzględnia wyniki, które dotyczą teoretycznych rozważań zachowania się związanych na fazie stacjonarnej łańcuchów umiejscowionych w rozpuszczalniku złożonym przez cząsteczki liniowe, zawierających jeden rodzaj oligomerów oraz roztworach typu oligomer-monomer. W publikacji H11, habilitant uwzględnił wyniki modelowania metodą dynamiki molekularnej tzw. dimerów Janusa, przytwierdzonych do powierzchni ciał stałych, uzyskując kilka istotnych wniosków. Szczególnie interesująca jest możliwość wpływania na proces adsorpcji i retencji poprzez projektowanie oddziaływań pomiędzy wszystkimi składnikami (monomerami i segmentami) i modyfikowanie typu łańcuchów polimerowych. W publikacjach H12-H19 zostały opisane wyniki uzyskane teoretycznie metodami dynamiki molekularnej mające na celu rozważanie układów zbudowanych z nanocząstek i przyłączonych do nich różnych ligandów. Docelowo habilitant skupił się nad pięcioma różnymi zagadnieniami o istotnym znaczeniu. Wnioski z badań zostały omówione w autoreferacie.

Ważnym elementem autoreferatu, zamieszczonym w czwartej sekcji, który dodatkowo pozwala zrozumieć i ocenić możliwy stopień samodzielności habilitanta, są przedstawione perspektywy. W tej części autoreferatu opisuje on możliwe kierunki rozwoju własnych badań, których fundamentem niewątpliwie są wnioski wypływające wprost z symulacji teoretycznych przeprowadzonych w ramach osiągnięcia naukowego będącego podstawą składanego wniosku habilitacyjnego. W szczególności, obiektem dalszych zainteresowań będą układy złożone z różnego rodzaju polimerów związanych z powierzchnią, o interesujących własnościach. Choć przyszłe zainteresowania habilitanta są związane z teorią funkcjonu gęstości, to proponowane obszary zastosowań wydają się już teraz bardzo obiecujące. Warto podkreślić, że na realizację tychże badań własnych Pan dr Tomasz Staszewski już poszukuje środków z zewnętrznych źródeł. Poszczególne zadania badawcze zostały uwzględnione w propozycji projektu skierowanego do Narodowego Centrum Nauki.

Na całkowity dorobek naukowy Pana dra Tomasza Staszewskiego składają się 33 artykuły, które ukazały się w recenzowanych czasopismach w latach 2004-2020. W wykazie dorobku naukowego nie znajdujemy żadnej informacji na temat rozdziałów książkowych, co jest rzadką praktyką komunikowania wyników badań w środowisku. Do momentu uzyskania stopnia naukowego doktora opublikował on osiem artykułów, a po 25. Biorąc pod uwagę kryterium efektywności publikowania wyraźnie widać, że jego aktywność naukowa znacząco wzrosła (ponad trzy razy). W chwili obecnej, w bazie Web of Science, znajdujemy 34 artykuły, których łączna liczba cytowań wynosi 256, a po usunięciu autocytowań 154. Jego indeks Hirscha jest na poziomie 9.

Pan dr Tomasz Staszewski brał również udział w konferencjach odbywających się w kraju za granicą. Łącznie wygłosił na nich trzy wykłady (jeden na zaproszenie imienne w Instytucie Agrofizyki PAN w Lublinie, jeden na 10 konferencji *International Symposium Effects of Surface*

Heterogeneity in Adsorption i jeden wykład na konferencji organizowanej przez macierzystą uczelnię). W tym obszarze, zważywszy jego okres zatrudnienia, widać raczej małe zaangażowanie. Zdecydowanie lepiej wygląda jego aktywność związana z przedstawianiem posterów (39), choć ta forma komunikowania wyników badań zazwyczaj budzi większe zainteresowanie podczas oceny aktywności doktorantów.

Pan dr Tomasz Staszewski był wykonawcą w dwóch projektach badawczych, które zakończyły się odpowiednio w 2012 i 2019 r. Tematyka tychże projektów miała związek z obszarem zainteresowań badawczych habilitanta. W dokumentacji nie odnalazłem informacji o podejmowanych próbach składania przez niego wniosków grantowych.

W okresie zatrudnienia Pan dr Tomasz Staszewski odbył dwa krótkoterminowe staże naukowe w Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences, Ukraina oraz w Instytucie Agrofizyki PAN w Lublinie. Z w pełni uzasadnionych powodów osobistych habilitant nie mógł zrealizować długoterminowego stażu naukowego. Należy podkreślić, że w cyklu habilitacyjnym znajdujemy publikacje, które powstały w wyniku współpracy międzynarodowej. Niemniej jednak, mając na względzie specyfikę prowadzonych badań, habilitant może zintensyfikować współpracę międzynarodową, co jak pokazuje obecna sytuacja pandemiczna nie musi wiązać się z fizycznym bezpośrednim kontaktem.

Działalność dydaktyczna Pana dra Tomasza Staszewskiego obejmuje prowadzenie różnych form zajęć. Wśród nich są wykłady z zakresu informatyki, różne laboratoria, konwersatoria i seminaria. Można powiedzieć, że zakres prowadzonych przez niego zajęć jest urozmaicony. Jak dotąd, habilitant prowadził dwie prace dyplomowe. Choć to bardzo niewielka liczba, mam jednak świadomość, że użyteczne symulacje komputerowe i obliczenia teoretyczne nie są w stanie przyciągać wielu potencjalnych dyplomantów. Jest to powszechny problem. Wyniki ankiet studenckich jego zajęć są bardzo dobre, co świadczy o docenieniu go przez studentów habilitanta jako dobrego dydaktyka.

Działalność organizacyjna Pana dra Tomasza Staszewskiego w głównej mierze sprowadza się do udziału Dniach Otwartych na Wydziale Chemii UMCS, a także administrowania pracownikami komputerowymi i serwerami obliczeniowymi. To bardzo istotne i zarazem czasochłonne działania, choć nie zawsze wystarczająco dostrzegane przez innych.

Po dokonaniu analizy osiągnięcia naukowego Pana dra Tomasza Staszewskiego, a także po przeprowadzeniu całościowej oceny Jego działalności naukowej, dydaktycznej oraz organizacyjnej, stwierdzam, że spełnia on wymagania zwyczajowe i obowiązujące standardy, co pozwala na wystąpienie z wnioskiem o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Pan dr Tomasz Staszewski jest dojrzałym naukowcem. Ma dobrze rozwinięty warsztat naukowy i jest gotów do podjęcia nowych wyzwań. Niniejszym, popieram wniosek Pana dra Tomasza Staszewskiego o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie nauki chemiczne.