Uniwersytet Śląski w Katowicach

INSTYTUT CHEMII

40-006 Katowice, Szkolna 9, tel/fax. +48(32)259-99-78, ich.wnst@us.edu.pl

---

Prof. dr hab. Stanisław Kucharski Katowice, 21 stycznia 2022

Recenzja osiągnięcia naukowego dr. Tomasza Staszewskiego zatytułowanego *"Teoria i symulacje układów zawierających łańcuchy przyłączone do powierzchni ciał stałych i nanocząstek"*. **oraz całokształtu dorobku naukowego,**

w związku z postępowaniem habilitacyjnym prowadzonym przez Radę Naukową Instytutu Nauk Chemicznych Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie.

Dr Tomasz Staszewski ukończył studia wyższe na Wydziale Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie w roku 2003 uzyskując tytuł zawodowy magistra chemii. W roku 2010 Rada Wydziału Chemii tej samej uczelni nadała Mu stopień naukowy doktora nauk chemicznych na podstawie przedłożonej rozprawy doktorskiej zatytułowanej "*Cząsteczki łańcuchowe w pobliżu ciał stałych*" zrealizowanej pod kierunkiem prof. dr hab. Małgorzaty Borówko. Od roku 2003 pracuje jako nauczyciel akademicki na Wydziale Chemii UMCS, najpierw na stanowisku asystenta, a od roku 2010 do chwili obecnej na stanowisku adiunkta.

Na dorobek naukowy Habilitanta składają się 33 prace (w tym 25 prac po uzyskaniu stopnia doktora), opublikowane w czasopismach indeksowanych w bazie Journal Citation Report. Zdecydowana większość publikacji została zamieszczona w czasopismach z najwyższej półki o współczynniku IF większym od dwóch, ale zdarzają się też czasopisma, zwłaszcza w ostatnich latach, o IF większym od 3 lub 4. Sumaryczny IF wszystkich publikacji osiąga wysoką wartość 91 punktów, co odpowiada wartości blisko 2300 punktów ministerialnych (w przeliczeniu na punktację obowiązującą obecnie).

Habilitant bierze aktywny udział w konferencjach naukowych: Jego wyniki były prezentowane w formie posterów na 39 międzynarodowych sympozjach, wygłosił także dwa wyklady na zaproszenie.

Prace Hablilitanta były cytowane ponad 150 razy (bez autocytowań), Jego indeks Hirscha wynosi 9.

Ocena osiągnięcia naukowego

Wyniki badań składające się na osiągnięcie naukowe zostały zawarte w dziewiętnastu publikacjach, wszystkie z wyjątkiem jednej (H19), to publikacje wieloautorowe. Liczba współautorów ograniczona jest do wąskiego grona współpracowników. Są więc prace dwuautorowe (5), trójautorowe (8), czteroautorowe (4), jedna praca pięcioautorowa i jedna wspomniana wcześniej monoautorska. W jedenastu z nich Kandydat jest autorem korespondującym. Do wszystkich prac dołączono stosowne oświadczenia współautorów odnośnie do ich udziału w pracy.

W tym obszernym materiale badawczym, włączonym do osiągnięcia naukowego, Habilitant wyróżnia dwie grupy prac, związane z dwoma wątkami tematycznymi. Osnową pierwszego z nich są symulacje komputerowe opisujące proces adsorpcji na gładkich powierzchniach modyfikowanych przez osadzenie na nich łańcuchów polimerowych, tworzących tzw. szczotki polimerowe. Tematyka ta została przedstawiona w jedenastu pracach: H1 do H11, zgodnie z oznaczeniem przyjętym w Autoreferacie. Niemal we wszystkich (wyjątek stanowi praca H11) zastosowana metoda obliczeniowa oparta jest na teorii funkcjonałów gęstości (DFT).

Druga grupa wyników (prace od H12 do H19) dotyczy układów zawierających nanocząstki z przyłączonymi ligandami, tworzące tzw. cząstki włochate. Te dwie kategorie tematyczne odróżniają się dodatkowo zastosowaną metodą obliczeniową, jako że niemal wszystkie obliczenia odnoszące się do cząstek włochatych wykonano metodą dynamiki molekularnej, konkretnie programem dostępnym w pakiecie LAMMPS.

Adsorpcja na szczotkach polimerowych przebiega w sposób znacznie bardziej skomplikowany niż na powierzchniach gładkich. Proces ten badano metodami teoretycznymi w pierwszych czterech pracach cyklu (H1 do H4). Zastosowano metodę DFT do wyznaczania izoterm adsorpcji, do badania struktury fazy powierzchniowej oraz selektywności procesu. Symulacje komputerowe pozwalają wyznaczać zależność parametrów charakteryzujących adsorpcję od szeregu czynników definiujących szczotkę, m.in. od gęstości pokrycia, długości przyłączonych łańcuchów, rodzaju i siły oddziaływania z powierzchnią. Tym co różnicuje poszczególne prace był skład mieszaniny, zawierającej adsorbowane cząsteczki, od zbioru oligomerów [H1] po roztwory binarne o zróżnicowanych składnikach [H2-H4]. Istotną obserwacją odnoszącą się do tej grupy prac jest fakt, że zastosowana metoda symulacyjna (po raz pierwszy użyta w odniesieniu do roztworów binarnych) pozwoliła poprawnie odtworzyć izotermy adsorpcyjne obserwowane doświadczalnie (por. pozycje literaturowe 63-68 w pracy H4).

Teoria funkcjonałów gęstości stała się w rękach Habilitanta użytecznym narzędziem do modelowania złożonych oddziaływań ważnych w wielu dziedzinach. Umiejętnie z niego korzysta. W pracy H6 wykazano przydatność metody DFT do opisu procesu chromatograficznego poprzez badanie retencji cząsteczek kulistych i liniowych na chemicznie związanych fazach. Udało się także wykonać symulacje DFT dla szczotek zawierających dwa rodzaje łańcuchów, z których jeden stanowił grupę funkcyjną [H5], natomiast w pracy H10 rozważano szczotki kopolimerowe, tworzone przez dodatnio i ujemnie naładowane fragmenty kopolimeru.

Tzw. cząstki włochate, czyli nanocząstki z przyłączonymi różnorodnymi ligandami, stanowiły przedmiot badań w drugiej grupie prac wchodzących w zakres osiągnięcia naukowego. Do ich badania zastosowano metodę dynamiki molekularnej. Rozważano obiekty z przyłączonymi czterema kulistymi ligandami do kwadratowego podłoża (H12), a także z trzema liniowymi oligomerami zakotwiczonymi przy nanocząstce w kształcie dysku (H13). W pracy H14 przebadano przemiany fazowe nanocząstek z przyłączonymi łańcuchami kopolimerów typu pręt-kłębek. Dla tych struktur udało się skorelować naturę przemian fazowych z mobilnością, liczbą i kształtem przyłączanych ligandów. Jeszcze ważniejsza okazuje się możliwość przewidywania stopnia i formy agregacji (łańcuchy, warstwy, struktury trójwymiarowe) w zależności od charakterystyki przyłączonych ligandów.

Wyniki przedstawione w pracy H16 opisują zachowanie się kulistych nanocząstek (rdzeni) z pojedynczym łańcuchem w pobliżu powierzchni stałej. Podobne badania dla nanocząstek z ligandami w pobliżu sztywnej ściany opisano w pracy H17, przy czym dopuszczono możliwość przyłączania do rdzenia więcej niż jednego ligandu. Stosując zarówno metodę DFT jak i metodę dynamiki molekularnej uzyskano szczegółowy opis warstw tworzących się przy stałej powierzchni łącznie z profilami gęstości.

W pracy H18 dokonano symulacji zachowań nanocząstek włochatych w obecności rdzeni pozbawionych ligandów, określonych w pracy jako cząstki izotropowe, tworzące płyn w jakim zanurzone są cząstki włochate. Dynamika molekularna, umiejętnie zastosowana, stwarza możliwość prześledzenia zależności wpływu różnych parametrów na morfologię cząstek z przyłączonym ligandem. Wyniki są bardzo interesujące. W zależności od założonej siły oddziaływania (zerowe, umiarkowane, silnie przyciągające) cząstek płynu z cząstkami wyposażonymi w ligandy możemy obserwować agregaty o różnych formach, np. struktury typu ośmiornicy lub kolby kukurydzy.

Podobne zagadnienia były podejmowane w pracy H19. Zbadano metodą dynamiki molekularnej konglomeraty włochatych nanocząstek powstałe przez przyłączenie różnych typów ligandów do kulistego rdzenia. W zależno-

ści od rodzaju ligandu (rozważono trzy modele) mogą się pojawić agregaty o nietrywialnej strukturze warstw polimerowych przedstawionych w omawianej pracy. Uzyskane przez Autora rezultaty znalazły potwierdzenie w badaniach eksperymentalnych.

Szczegółowe informacje o udziale współautorów w przygotowaniu poszczególnych publikacji zamieszczone w Autoreferacie wskazują, że Kandydat niemal w każdej pracy był osobą odpowiedzialną za wykonanie symulacji komputerowych, a w razie potrzeby także za wprowadzenie modyfikacji do programu komputerowego. Dotyczyło to także opracowania modułów programowych, przeznaczonych np. do wyznaczania profili gęstości (H3,H4,H8,H11), izoterm adsorpcji (H5,H7,H9), wysokości szczotki (H5,H7,H9), współczynników retencji (H6), itp.. Podobna sytuacja miała miejsce przy korzystaniu z pakietu LAMMPS, dla którego należało opracować i zaprogramować szereg procedur wspomagających, np. modułów do generowania konfiguracji startowych, procedur generujących diagramy fazowe, etc.. Niezależnie od tego Kandydat uczestniczył w przygotowaniu koncepcji każdej z prac oraz był zaangażowany w opracowanie wyników i prace redakcyjne.

Nie mam zatem wątpliwości, że udział Kandydata we wszystkich pracach włączonych do osiągnięcia naukowego jest znaczący. Jestem pełen uznania dla Jego sprawności w posługiwaniu się metodami obliczeniowyni, a także biegłości w manipulowaniu złożonymi wyrażeniami algebraicznymi oraz w ich komputerowej implementacji.

Jeżeli miałbym wskazać słabą stronę związaną z przedstawionym osiągnięciem naukowym to wskazałbym na, oględnie mówiąc, umiarkowany rezonans, jaki wywołują prace Kandydata. Nawet najstarsze prace, np. te z lat 2011 lub 2012, mają zaledwie po kilka cytowań (pominąwszy autocytowania oraz cytowania współpracowników). Kładę to na karb hermetyczności tematyki, ale może to być związane z mniejszym zakresem współpracy międzynarodowej w owym czasie. Można oczekiwać, że wartościowe wyniki uzyskane przez Kandydata w ostatnich dwóch latach znajdą uznanie w środowisku, co zwiększy zainteresowanie Jego pracami.

Powyższa uwaga nie umniejsza mojego uznania dla wyników naukowych uzyskiwanych przez Kandydata. Zatem, podsumowując, mogę stwierdzić, że ten aspekt wniosku habilitacyjnego, który jest związany z osiągnięciem naukowym, jest przeze mnie oceniony wysoko.

Ocena działalności badawczej Habilitanta niewłączonej do osiągnięcia naukowego

Tematyka badawcza dr. Tomasza Staszewskiego realizowana przed uzy-

skaniem stopnia doktora (osiem publikacji) była zogniskowana wokół zagadnień podobnych do tych, wchodzących w zakres osiągnięcia naukowego i dotyczyła badań adsorpcji cząsteczek kulistych i łańcuchowych w porach szczelinowych i na powierzchniach pokrytych chemicznie związanymi fazami. Ponieważ Kandydat zdecydował włączyć do swojego osiągnięcia naukowego aż 19 prac, więc z Jego całkowitego dorobku publikacyjnego (całkiem przyzwoitego, liczącego, jak wspomniałem na wstępie, 33 prace) pozostaje tylko sześć prac, które nie były włączone ani do doktoratu ani do osiągnięcia habilitacyjnego. Trzy z nich poświęcono badaniom dimerów Janusa, pozostałe trzy odnoszą się także do problemów związanych z przejściami fazowymi i obliczeniami bądź metodą *Monte Carlo* bądź DFT. Nawiasem mówiąc, niemal wszystkie zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach (dwie, TS10 i TS11 w *J.Chem.Phys.*, a trzy, TS12-TS14, w *J.Phys.Chem.B*, obecna punktacja ministerialna tego ostatniego: 140).

Chciałbym odnieść się do formalnych wymogów Ustawy, z których wynika, iż aktywność naukowa Kandydata "*winna być realizowana w więcej niż jednej uczelni*". Uważam, że warunek ten jest spełniony w przypadku opiniowanego wniosku. Kandydat odbył w roku 2012 jeden staż zagraniczny w Ukraińskiej Akademii Nauk we Lwowie, drugi, dwumiesięczny krajowy, w Instytucie Agrofizyki Polskiej Akademii Nauk. W Autorefereacie jest także informacja o zaawansowanych przygotowaniach do wyjazdu na długoterminowy staż do Danii, przerwanych ze względów osobistych. W tym kontekście jest także ważny fakt, że kilka prac w dorobku Kandydata powstało w ramach współpracy międzynarodowej: prace TS6 oraz H17, zrealizowane we współpracy z O. Pizio (Meksyk); praca TS14 – we współpracy z T. Pöschelem (Erlangen,Niemcy) oraz praca H10 - we współpracy z J.Ilnytskyim (Lwów). Zakres tej współpracy jest dość skromny, ale w mojej opinii spełnia wymogi Ustawy.

Ocena działalności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzatorskiej

Habilitant prowadzi zajęcia dla studentów kierunków i specjalności realizowanych na Wydziale Chemii UMCS. Zakres tych zajęć jest dość szeroki, obejmują one: wykład *Zastosowanie informatyki w chemii* (dla kierunków Analityka chemiczna oraz Chemia kryminalistyczna), zajęcia laboratoryjne, konwersatoria i seminaria.

Zajęcia laboratoryjne związane są z szeroko rozumianym zastosowaniem informatyki w chemii i obejmują: modelowanie matematyczne, metody informatyczne, zastosowania informatyki, podstawy użytkowania komputerów oraz podstawy użytkowania internetu.

Konwersatoria to zróżnicowane w treści zajęcia z chemii analitycznej, natomiast seminaria są realizowane w ramach przedmiotu specjalizacyjnego oraz jako seminarium dyplomowe. Do tego dochodzi jeszcze prowadzenie pracowni dyplomowej i magisterskiej oraz promotorstwo w dwóch pracach dyplomowych.
Jak widać z powyższego zestawienia Kandydat jest mocno zaangażowany w wydziałową dydaktykę i ten aspekt Jego aktywności akademickiej oceniam bardzo pozytywnie.

Do obowiązków Kandydata należy również nadzór nad studenckimi pracowniami komputerowymi oraz administrowanie głównym klastrem obliczeniowym. Traktuję to jako formę działalności organizacyjnej.

O działalnosci popularyzatorskiej nie ma wzmianki w Autoreferacie, ale w ramach tej formy aktywności można uwzględnić udział w Dniach Otwartych na Wydziale Chemii UMCS.

Podsumowanie

Wniosek dr. Tomasza Staszewskiego spełnia wszystkie formalne wymagania Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. W szczególności Kandydat:

- posiada stopień doktora
- nie ubiegał się wcześniej o nadanie stopnia doktora habilitowanego
- przedstawił cykl powiązanych tematycznie artykułów opublikowanych w czasopismach naukowych
- wykazał się aktywnością naukową realizowaną poza macierzystą uczelnią.

Pozytywnie oceniam przedłożony wniosek także od strony merytorycznej. Kandydat wykazał się znaczącym dorobkiem naukowym, przedstawił wartościowe osiągnięcie naukowe i udokumentował zaangażowanie w inne formy aktywności akademickiej.

Biorąc to pod uwagę stwierdzam, iż dr Tomasz Staszewski spełnia bez zastrzeżeń wymagania formalne i merytoryczne wynikające z *Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* **z dnia 20 lipca 2018 roku odnoszące się do prac habilitacyjnych, i w związku z tym wnoszę o dopuszczenie dr. Tomasza Staszewskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.**

Stanisław Kucharski