

Prof. dr hab. Jacek Korchowiec
Zakład Chemii Teoretycznej
im. Prof. K. Gumińskiego
Wydział Chemii UJ
ul. Gronostajowa 2
30-387 Kraków

Kraków, 21.05 2021 r.



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

RECENZJA
dorobku naukowego dr inż. Piotra Aleksandra Batysa
włączonego do rozprawy habilitacyjnej

zatytułowanej

„Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów
tworzenia i właściwości kompleksów polielektrolitów”

Wydział Chemii

Uwagi ogólne

Kariera naukowa pana dr Piotra Batysa związana jest z Krakowem. Tytuł zawodowy magistra chemii uzyskał w 2010 roku na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej im. Tadeusza Kościuszki, broniąc pracę magisterską „Otrzymywanie porowatych tworzyw z proszków metali w procesie spiekania pod ciśnieniem – wpływ parametrów prasowania na kinetykę procesu utleniania wytworzonych materiałów”, którą wykonał pod kierunkiem dr inż. Artura Jaronia. Uzyskany tytuł zawodowy stał się przepustką, umożliwiającą mu przystąpienie do Interdyscyplinarnych Studiów Doktoranckich „Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości”. Studia te były prowadzone wspólnie przez trzy krakowskie jednostki naukowe: Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk (IKiFP PAN), Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej (AGH) im. Stanisława Staszica oraz Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk. Ukoronowaniem tego okresu jego kariery naukowej był stopień doktora nauk chemicznych nadany mu przez Radę Naukową IKiFP PAN w Krakowie, za rozprawę doktorską „*Surface and transport properties of nanoparticle multilayers*”, którą przygotował pod kierunkiem dr hab. Pawła Werońskiego, prof. IKiFP. Zaangażowanie pana Piotra Batysa w prowadzenie badań naukowych wchodzących do jego pracy magisterskiej i doktorskiej było wielokrotnie zauważone. Wyrazem tego były stypendia naukowe i projakościowe, które otrzymał na Politechnice Krakowskiej i AGH, oraz nagrody za najlepszą, oryginalną pracę naukową IKiFP PAN. Na uwagę zasługuje też fakt udziału w specjalistycznych szkoleniach w obszarze modelowania molekularnego metodami klasycznymi, w trakcie których miał możliwość praktycznego zapoznania się z wieloma narzędziami obliczeniowymi współczesnej nauki.

ul. Gronostajowa 2

30-387 Kraków

tel. +48 12 686 26 00

fax +48 12 686 27 50

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

Od października 2015 roku dr Piotr Batys zatrudniony jest w IkiFP PAN, pracując w grupie prof. Zbigniewa Adamczyka. W trakcie tego zatrudnienia przebywał na długoterminowym stażu podoktorskim na jednym z najmłodszych uniwersytetów europejskich, tzn. Uniwersytecie Aalto w Finlandii. Był to ważny etap jego rozwoju i działalności naukowej. Zdecydowana większość prac wchodzących do recenzowanego przeze mnie osiągnięcia habilitacyjnego powstała w trakcie stażu podoktorskiego w Finlandii lub we współpracy z tym ośrodkiem. Łączny dorobek Habilitanta obejmuje 24 artykuły naukowe opublikowane w czasopismach z listy JRC (stan na moment złożenia wniosku habilitacyjnego). Wszystkie ukazały się w renomowanych czasopismach o wysokim współczynniku oddziaływania. Prace te można podzielić na 3 równoliczne zbiory: prace powstałe przed doktoratem, prace powstałe po doktoracie i nie wchodzące do osiągnięcia habilitacyjnego oraz prace stanowiące podstawę osiągnięcia habilitacyjnego. Analiza baz danych pozwala przekonać się, że wystąpienie z niniejszym wnioskiem nie było przedwczesnym ruchem ze strony Habilitanta. Praktycznie wszystkie przytaczane przez niego indeksy naukowometryczne, za wyjątkiem indeksu Hirscha, uległy w przeciągu tego krótkiego okresu czasu znacznej korekcie. Pokazuje to dużą aktywność naukową pana dr Piotra Batysa. Habilitant nie stroni od nawiązywania współpracy międzynarodowej. Wyniki uzyskane w trakcie prowadzonych badań były prezentowane na wielu międzynarodowych konferencjach w formie plakatów i komunikatów, tak osobiście przez Habilitanta, jak i osoby z którymi współpracował.

W nauce istotnym elementem jest pozyskiwanie funduszy na prowadzenie badań. Habilitant na tym polu notuje już sukcesy. Zaczął od grantu NCN typu Miniatura, które są łatwiejsze w uzyskaniu. Aktualnie kieruje projektem NCN typu Sonata. Ponadto był wykonawcą kilku innych projektów realizowanych, tak w Polsce, jak i poza jej granicami.

Złożona przez Kandydata dokumentacja wskazuje, że wniosek ten nie był wcześniej procedowany. Zostanie przeze mnie oceniony pod kątem spełnienia kryteriów ustawowych (art. 219 ust. 1 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku), zgodnie z którą kandydat do stopnia naukowego: (i) posiada stopień doktora; (ii) posiada w dorobku cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, wnoszących znaczny wkład w rozwój dyscypliny naukowej; (iii) wykazuje się istotną aktywnością naukową, realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej. W związku z zapisami ustawy ograniczę się do punktu drugiego, niemniej przedstawię swoje stanowisko dotyczące innych punktów na potrzeby prac Komisji powołanej przez Radę Doskonałości Naukowej.

Ocena osiągnięcia habilitacyjnego

Dostarczone mi materiały zawierają wszystkie dokumenty niezbędne do oceny wniosku i przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego. Dokumentacja przygotowana jest w dwóch wersjach językowych. Zawiera wszystkie załączniki, w tym kopie publikacji i materiałów uzupełniających. W autoreferacie zatytułowanym „Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia i właściwości kompleksów polielektrolitów” omówiono cele prowadzonych badań oraz przedstawiono w zwartej formie najważniejsze wyniki osiągnięcia

naukowego. Zgodnie z wymogami w przesłanej dokumentacji zamieszczono informacje o pozostałych publikacjach wchodzących w skład dorobku Kandydata do stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Osiągnięcie habilitacyjne dr Piotra Batysa to zbiór 8 artykułów opublikowanych w bardzo dobrych czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Wszystkie publikacje zawierają materiały uzupełniające. Dwie prace z tego cyklu ukazały się w J. Phys. Chem. C, dwie w Macromolecules, po jednej w PCCP, ACS Cent. Sci, J. Phys. Chem. B i Soft Matter. Habilitant ocenia swój udział w powstaniu tych prac odpowiednio na 60% (H1), 25% (H2), 30% (H3), 70% (H4), 35% (H5), 20% (H6), 60% (H7) i 55% (H8). W trzech artykułach (H1, H7 i H8) jest autorem korespondencyjnym. Rzeczywiście, oszacowany przez Habilitanta procentowy udział w powstaniu tych trzech publikacji przekracza 50%. Wydaje się więc, że procentowy udział w powstaniu każdej z prac cyklu habilitacyjnego został dobrze wyważony przez Habilitanta. Wszystkie prace cyklu habilitacyjnego są wieloautorskie. Liczba współautorów waha się od trzech do siedmiu osób. Wszyscy współautorzy zamieścili stosowne oświadczenia. Z oświadczeń wynika, że za wyjątkiem dwóch osób, M. Sammalkorpi i Z. Adamczyka, wszyscy pozostali współautorzy odpowiedzialni byli za część eksperymentalną prac. Do grona tych osób nie wliczyłem studentów, którzy wykonali część obliczeń pod opieką Habilitanta i M. Sammalkorpi. Oświadczenia tych osób nie budzą moich wątpliwości. Widać więc wyraźne rozdzielenie kompetencji. Pozostaje więc kwestia dwóch wcześniej wspomnianych osób. Z oświadczeń M. Sammalkorpi wynika, że jako kierownik grupy badawczej była odpowiedzialna za projekty badawcze i planowanie badań. Z kolei z oświadczeń Z. Adamczyka wynika, że odpowiedzialny był, poza ogólną koncepcją badań i częściową redakcją manuskryptów, za opracowanie różnorodnych modeli fizykochemicznych zastosowanych we wspólnych pracach z Habilitantem. Można więc śmiało stwierdzić, że dr Piotr Batys był w całości odpowiedzialny za przeprowadzenie symulacji metodami klasycznej dynamiki molekularnej, opracowanie wyników i napisanie stosownych fragmentów wspólnych prac.

Zdumiewa mnie jedynie opis Kandydata do pracy H1, w którym napisał „przygotowanie plików wejściowych dla magistrantki (Sohvi Luukkonen)”. Mogę zrozumieć, że przygotowanie takich plików nie jest łatwe (budowa układu o założonej strukturze i gęstości ładunku), niemniej nigdy nie wręczyłbym gotowych plików studentowi. Pracowałbym ze studentem aby nauczyć go tej złożonej czynności, poświęcając własny czas, ale taka jest rola nauczyciela. Jakby nie było pełnił on wspólnie z M. Sammalkorpi rolę opiekuna naukowego tej osoby. Mam nadzieję, że takiego błędu Habilitant, który jak na razie nie ma dużego doświadczenia dydaktycznego, nie powtórzy w przyszłości. Nie zawsze czas jest najważniejszy, mam tu na myśli szybkość realizacji badań do nowej publikacji naukowej. Należy niejednokrotnie uzbroić się w cierpliwość aby uzyskać od studenta to co sam jestem w stanie zrobić niemal natychmiast.

Cykl habilitacyjny związany jest z badaniami szerokiej klasy materiałów polimerycznych jakimi są polielektrolity. Polimery te posiadają ciekawe właściwości wynikające z obecności w ich budowie jonowych lub łatwo jonizujących grup funkcyjnych. Właściwości tych

materiałów można w znacznym stopniu kontrolować przez dobór warunków fizykochemicznych procesu ich syntezy. Szczególnie ciekawe są właściwości mieszanych układów anionowo/kationowych. Habilitant postawił sobie za cel zrozumienie na poziomie molekularnym wpływu różnorodnych parametrów fizykochemicznych na zachowanie się polielektrolitów w roztworach wodnych, w tym mechanizmu tworzenia kompleksów polielektrolitów. W swoich badaniach dr Piotr Batys skoncentrował się na polianionach takich jak poli(kwas akrylowy) (PAA), poli(4-styrenosulfonian sodu) (PSS) i poli(kwas glutaminowy) (PGA) oraz polikationach takich jak poli(chlorek diallilodimetyloamoniowy (PDA), poli(L-lizynie) (PLL) i poli(chlorowodoru alliloaminy) (PAH). Opisywał także kompleksy polielektrolitów, powstające w wyniku samoorganizacji przeciwnie naładowanych polijonów. Większość badań prowadzonych bezpośrednio przez Kandydata to symulacje metodami klasycznej dynamiki molekularnej. Wykorzystał zasadniczo dwa pola siłowe. Pole siłowe OPLS-aa zostało wykorzystane w pracy H1, H3-H7, natomiast pole siłowe AMBER 03 w pracy H2. Model wody TIP4P został użyty w pracach H1 i H3-H7, natomiast model wody TIP3P w pracy H2. Można śmiało powiedzieć, że wypracował jednolity protokół obliczeniowy dla polielektrolitów: symulacje z narzuconymi periodycznymi warunkami brzegowymi w zespołach kanonicznym i/lub izotermiczno-izobarycznym z użyciem pola siłowego OPLS-aa i modelu wody TIP4P. Co istotne, w jednej z prac wchodzących do cyklu habilitacyjnego, tj. pracy H8, sprawdzał adekwatność trzech różnych pól siłowych do opisu polipeptydów, szczególnej klasy polielektrolitów, w środowisku wodnym. Oprócz wcześniej wspomnianego pola siłowego OPLS-aa autor cyklu habilitacyjnego testował jeszcze pole siłowe CHARMM-27 i AMBER99SB*-ILDNP. Szkoda, że w pracy użyto wyłącznie modelu wody TIP3P. Miałbym wtedy pełniejszą jej łączność z metodologią prac H1-H7. Praca ta powstała jako ostatnia i mogła być elementem spinającym całość, chodzi mi w tym miejscu o zastosowaną metodologię obliczeniową. Mimo to, Habilitant pokazał w tej pracy adekwatność użycia pola siłowego OPLS-aa do opisu wysoce zjonizowanych układów.

Część prac wchodzących do cyklu habilitacyjnego miała bardziej ogólny charakter; prace te odnosiły się do szeregu układów molekularnych lub opisywały konkretne zjawisko fizyczne. Inne były bardziej specyficzne i dotyczyły pojedynczych układów molekularnych. Tak na przykład w pracy H1 analizowano zjawisko kondensacji różnorodnych jonów (Na^+ , K^+ , Cl^- , Br^-) w układach zawierających polianiony (PSS, PGA, PAA) i polikationy (PDA, PLL, PAH). Praca H3 dotyczyła mechanizmu przejścia szklanego w kilku układach molekularnych, dla których autorzy wyjaśnili rolę cząsteczek wody w tym procesie. Praca ta pokazuje, jak wiele dodatkowych informacji, niemożliwych do uzyskania w bezpośrednim pomiarze, dostarczają symulacje metodami dynamiki molekularnej. Inne prace, jak praca H2 były poświęcone PLL. Niektóre z prac dotyczyły kompleksów polielektrolitów. W pracy H4 badano układ złożony z PDADMA i PSS, a w pracy H7 PAH-PSS i PDADMA-PAA. Niezależnie od stopnia ogólności, Kandydat wyznaczał szereg parametrów fizykochemicznych, istotnych z punktu widzenia kontroli mechanizmu tworzenia się mono- i wielowarstwowych polielektrolitów. Analizował wpływ różnych czynników, takich jak pH, siła jonowa, temperatura, stopień uwodnienia na wyznaczone parametry. Z tego względu cykl habilitacyjny jest istotnym, oryginalnym wkładem w rozwój nauki, o dużym znaczeniu dla szeroko rozumianej nanotechnologii.

Nie mam wątpliwości, że przedstawiony cykl jest spójny tematycznie i rozwiązuje istotne problemy badawcze. Kompetencje współautorów były rozłączne. Pan dr inż. Piotr Batys był w pełni odpowiedzialny za teoretyczny opis wszystkich badanych układów. Do najważniejszych osiągnięć Habilitanta można zaliczyć: opis wpływu grup funkcyjnych występujących w polielektrolitach na zjawisko kondensacji; wyznaczenie konformacji, średnich długości, średnich przekrojów, efektywnych ładunków wybranych polielektrolitów w środowisku wodnym; opis zjawiska przejścia szklistego w wybranych kompleksach polielektrolitów; opis trwałości par jonowych skompensowanych wewnętrznie; analiza adekwatności różnych pól siłowych do opisu zjonizowanych polipeptydów.

Ocena dorobku dydaktycznego

Pan dr inż. Piotr Batys zatrudniony jest od 2015 roku w IKiFP PAN w Krakowie. Do 2019 roku pracował na stanowisku specjalisty, a od 2019 roku na stanowisku adiunkta. Zakres jego obowiązków, szczególnie w I etapie zatrudnienia, nie obejmował dydaktyki. Jednostka, w której pracuje Kandydat prowadzi studia III stopnia. Z tej racji liczba godzin dydaktycznych jest niewielka w porównaniu z uniwersytetami prowadzącymi studia na wszystkich poziomach kształcenia. W związku z tym doświadczenie dydaktyczne Kandydata jest stosunkowo niewielkie i ogranicza się do opieki nad doktorantami, magistrantami i dyplomantami, którą sprawował w trakcie stażu podoktorskiego w Finlandii wraz z bezpośrednim fińskim przełożonym lub osobami z jego grupy badawczej. Opieka/promotorstwo jest szczególnym, bardzo indywidualnym i czasochłonnym trybem nauczania, często przygotowującym studentów do pracy naukowej w grupie opiekuna. W załączonej dokumentacji Habilitant podał informację o sprawowaniu opieki nad 4 doktorantami i 5 magistrantami. Biorąc pod uwagę długość stażu podoktorskiego jest to znaczna liczba.

Na uwagę zasługuje też praca związana z popularyzacją nauki. Dr Piotr Batys brał udział w Festiwalach Nauki w Krakowie oraz dniach otwartych IKiFP PAN. Wszystkie, poza jedną, z tych aktywności miały miejsc w trakcie studiów doktoranckich.

Ocena dorobku organizacyjnego

Działalność organizacyjna dr inż. Piotra Batysa związana jest z projektami badawczymi. Pozyskiwanie funduszy na prowadzenie badań jest istotną sferą działalności każdej jednostki badawczej. Kandydat jest kierownikiem projektu SONATA finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki. Wcześniej uzyskał projekt Miniatura, którego celem jest prowadzenie badań pilotażowych, odbycie stażu naukowego, wyjazdu badawczego lub wyjazdu konsultacyjnego służącego przygotowaniu przyszłego projektu badawczego. W przypadku Kandydata projekt SONATA jest dowodem na to, że szczytne cele projektu Miniatura zostały osiągnięte. Bez cienia wątpliwości ta sfera jego działalności zasługuje na docenienie. Doświadczenie zdobyte w trakcie realizacji projektów będzie dla niego dobrym punktem wyjścia do budowy własnego zespołu badawczego.

Uwagi końcowe

Reasumując, uważam, że **całokształt dorobku naukowego dr inż. Piotra Batysa, Jego zaangażowanie w działalność naukową w pełni uzasadniają wystąpienie do Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk w Krakowie o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.** Rozprawa habilitacyjna Kandyda spełnia wszystkie wymogi stawiane rozprawom habilitacyjnym w art. 219 ust. 1 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku i wnoszę o dopuszczenie pana dr inż. Piotra Batysa do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Jacek Korcnowiec

