

Prof. dr hab. inż. Andrzej W. Trochimczuk
Katedra Inżynierii i Technologii Polimerów
Wydział Chemiczny
Politechnika Wrocławska
Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

RECENZJA

rozprawy habilitacyjnej dr. inż. Piotra Batysa pt.: "Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia i właściwości kompleksów polielektrolitów" oraz całokształtu dorobku naukowego.

Dr inż. Piotr Batys ukończył studia na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej, Politechniki Krakowskiej w roku 2010 i uzyskał tytuł magistra inżyniera po obronie pracy magisterskiej pt.: „Otrzymywanie porowatych tworzyw z proszków metali w procesie spiekania pod ciśnieniem – wpływ parametrów prasowania na kinetykę procesu utleniania wytworzonych materiałów” wykonanej pod kierunkiem dr. Artura Jaronia. Doktoryzował się w naukach chemicznych w zakresie chemii w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN w Krakowie.

Tytuł pracy doktorskiej: „Surface and transport properties of nanoparticle multilayers” w której promotorem był dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN.

Habilitant był słuchaczem interdyscyplinarnych studiów doktoranckich w latach 2010-2015 i bezpośrednio po studiach został zatrudniony w IKiFP jako specjalista w grupie badawczej „Koloidy”, a w roku 2019 awansował na stanowisko adiunkta, na którym jest zatrudniony obecnie.

Pan dr Piotr Batys odbył długoterminowy staż zagraniczny (typu post-doctoral) na dwóch wydziałach University Aalto w Finlandii (Department of Chemistry and Materials Science, School of Chemical Engineering i Department of Bioproducts and Biosystems, School of Chemical Engineering), które trwały w sumie ponad dwa lata.

Dorobek naukowy Pana dr. Piotra Batysa w okresie do uzyskania stopnia doktora tj. do roku 2015 obejmuje osiem publikacji naukowych, z tego siedem w czasopismach zagranicznych o dużym IF, w nich współautorem jest prof. Weroński, późniejszy

promotor pracy doktorskiej, jedna w Ochronie przed Korozją w której współautorem jest dr inż. Artur Jaroń.

Po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych przez Habilitanta opublikował On 25 prac w wiodących czasopismach. Prace te ukazały się, między innymi w: Langmuir, Int. Colloids and Interface Science. Z tych prac Habilitant wybrał osiem, stanowiących przedmiot dzieła habilitacyjnego.

Ten dorobek jest uzupełniony przez dużą liczbę wystąpień konferencyjnych, w postaci 14 komunikatów ustnych i 20 posterów w okresie do doktoratu oraz 11 komunikatów ustnych i 14 posterów w okresie po doktoracie. W zał. 4 Wykaz osiągnięć naukowych jest drobna nieścisłość – Habilitant nie wygłosił komunikatów konferencyjnych (jako osoba prezentująca zaznaczeni są inni współautorzy) a jest współautorem tych komunikatów.

Ocena rozprawy habilitacyjnej

Na przedstawione mi do oceny dzieło „Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia i właściwości kompleksów polielektrolitów”, mające być podstawą do nadania stopnia doktora habilitowanego, składa się osiem publikacji oraz załączony do nich jedenastostronicowy komentarz. W trzech tylko z tych publikacji Habilitant jest pierwszym autorem i jednocześnie autorem do korespondencji, w jednej publikacji jest pierwszym, w trzech jest drugim, a w jednej pracy jest czwartym w kolejności. Współautorzy tych prac złożyli oświadczenia, z których jednoznacznie wynika udział Dr. Batysa w publikacjach, oświadczenia te potwierdzają informacje podane przez samego Habilitanta w odniesieniu do każdej publikacji wchodzącej w skład dzieła habilitacyjnego. Nie mam wątpliwości, że rola Habilitanta w pracach i publikacjach jest bardzo ważna i że w obliczeniach metodą dynamiki molekularnej (MD) z rozdzielczością atomową jest On samodzielnie działającym ekspertem, a wiedza wniesiona przez Niego do opisywanych badań umożliwiła poznanie struktury oraz oddziaływań na poziomie molekularnym w badanych KPE.

Wszystkie prace ukazały się w bardzo dobrych czasopismach: Phys. Chem. Chem. Phys., o IF= od 3,90, J. Phys.Chem. C (2 publikacje) IF= 4,31, ACS Cent. Sci., IF= 12,84, Macromolecules (2 publikacje) IF=6,00, Soft Matter IF=3,14 i J.Phys. Chem. B. IF= 2,86. Uważam, że taki współczynnik oddziaływań świadczy o bardzo wysokim poziomie prac prowadzonych przez dr. Batysa. Potwierdzeniem tego, a

także dużej aktualności tematyki badawczej, będącej podstawą dzieła habilitacyjnego, jest duża liczba cytowań prac dr. Batysa, pomimo tego że większość z tych prac została opublikowana w ostatnich dwóch latach przed złożeniem wniosku habilitacyjnego. W autoreferacie podano, że sumaryczny IF tych ośmiu prac to 41,15 (co daje średnio 5,15 na pracę) i podano liczbę 62 cytowań niezależnych. Natomiast wg ISI prace wchodzące w skład rozprawy habilitacyjnej były cytowane 106 razy (na dzień sporządzenia recenzji), co daje $106/8=13,25$ cytowania na jedną pracę. Wszystkie prace Habilitanta były cytowane 276 (bez autocytowań 216) razy, co jest dobrym wynikiem. Średnia liczba cytowań na pracę wynosi $216/33=6,55$, co jest wynikiem dobrym.

Prace wchodzące w skład dzieła habilitacyjnego miały na celu otrzymanie i scharakteryzowanie samoorganizujących się kompleksów polielektrolitów. W tym celu użyto polielektrolitów o przeciwnych ładunkach, takich, jak np. poli(kwas akrylowy), poli(kwas styrenosulfonowy) oraz poli(alliloamina) czy poli(lizyna). Oddziaływania elektrostatyczne prowadzą do powstania kompleksów polielektrolitów. Oddziaływania te można w szerokim zakresie modyfikować poprzez odpowiedni dobór pH, siły jonowej, stężenia polielektrolitów. Otrzymane kompleksy podlegają działaniu tych samych czynników, a więc ich struktura może ulegać zmianom w rytm zmian pH, siły jonowej etc., co otwiera szereg interesujących zastosowań i stanowi pole do badań tych materiałów, a w szczególności dynamiki zmian kompleksów polielektrolitów w czasie eksperymentu. To z kolei pozwala na zastosowanie kompleksów jako elementów czujników etc.

Pomimo badań eksperymentalnych kompleksów polielektrolitów (KPE), brak jest w literaturze dogłębnych badań, które łączyłyby warunki otrzymywania KPE i właściwości KPE, a w szczególności pozwalałyby zrozumieć procesy zachodzące na poziomie molekularnym.

W publikacji H1 Habilitant opisał sposób w jakim stopień kondensacji jonowej jest uzależniony od rodzaju grup funkcyjnych polielektrolitów, rodzaju przeciwnionów oraz pH roztworu. Badania przeprowadzone były z udziałem jonów jednowartościowych (sodowy, potasowy, cesowy, chlorki i bromki) i wykazały, że zmodyfikowane równanie Poissona-Boltzmanna, uwzględniające efektywny promień cząsteczki polielektrolitu i energię oddziaływań specyficznych przeciwnionów, opisuje rozkład jonów na dużych odległościach. Model Poissona-Boltzmanna poprawnie opisuje

kondensację jonów pod względem promienia Manninga oraz ułamka skondensowanych przeciwnionów. Dla małych odległości od rdzenia polielektrolitu, zwłaszcza w przypadku silnie zlokalizowanego ładunku lub specyficznego miejsca wiązania jonów, model Poissona-Boltzmanna nie może być stosowany.

W pracach H2 i H6 dr Batys opracował procedury wyznaczania parametrów fizykochemicznych, takich, jak: efektywny ładunek elektryczny, a także parametry charakteryzujące konformacje łańcucha polimerowego: gęstość, długość i średnicę. Habilitant wyznaczył je dla wybranych PE. Wykazał, że dla poli(L-lizyny) w roztworach o małej sile jonowej, średnia długość łańcucha tego polielektrolitu zależy liniowo od liczby merów. Umożliwia to wyznaczenie długości równoważnej pojedynczego meru oraz ekstrapolację otrzymanych wyników dla dłuższych łańcuchów polielektrolitu, np. pozwala to obliczyć długość konturu PE o innej masie molowej. W pracy H6 dr Batys wykazał, że funkcjonalizacja poli(chlorowodorku alliloaminy) w reakcji z chlorkiem glicydylotrimetyloamoniowym, może powodować tworzenie się wiązań wodorowych między merami, co wpływa na stabilizację konformacji oraz zwiększa średnią odległość pomiędzy końcami łańcucha. *(z obowiązku recenzenta muszę zauważyć, że w autoreferacie Habilitant stosuje nieprawidłowo pojęcie monomer odnosząc się wyraźnie do powtarzającej się jednostki w łańcuchu polimeru czyli do meru).*

W pracy H3 badania dotyczyły wyjaśnienia molekularnych mechanizmów przejścia szklistego w uwodnionych kompleksach polielektrolitów.

W pracy H4 określił On wpływ stopnia uwodnienia KPE oraz temperatury na dynamikę cząsteczek wody w kompleksach polielektrolitów. Udowodnił, że przy małym stopniu uwodnienia KPE lub w niskich temperaturach, dominującym są ruchy rotacyjne cząsteczek wody. Zwiększenie temperatury lub stężenia wody zwiększało ruchy translacyjne cząsteczek H_2O . Otrzymane wyniki teoretyczne zostały potwierdzone eksperymentalnie pokazując, że w uwodnionych KPE silnie związane cząsteczki wody dominują. Również wartości współczynników dyfuzji obliczone teoretycznie zostały potwierdzone w późniejszych eksperymentach.

W pracy H5 ilość par jonowych skompensowanych wewnątrznie oraz wyznaczył granice stosowalności zasady superpozycji do opisu właściwości reologicznych kompleksów polielektrolitów.

Praca H7 poświęcona była roli wiązań wodorowych w tworzeniu i właściwościach par jonowych skompensowanych wewnętrznie, a także ich wpływowi na strukturę kompleksów polielektrolitów. Do badań użyto kompleksów poli(chlorowodorek alliloaminy)- poli(styrenosulfonian sodu) oraz poli(chlorek diallilodimetyloamoniowy)- poli(kwas akrylowy), badając wpływ cząsteczek wody oraz wiązań wodorowych pomiędzy cząsteczką wody a grupą funkcyjną polielektrolitu na stabilność par jonowych skompensowanych wewnętrznie. Wyznaczono ilościowo wpływ temperatury i stopnia uwodnienia kompleksu polielektrolitów na zdolność do tworzenia wiązań wodorowych. Potwierdzono, że trwałość par jonowych między polielektrolitami jest związana ze zdolnością PE do tworzenia wiązań wodorowych z cząsteczkami wody. W przypadku kompleksu PDADMA-PAA, zwiększenie ilości cząsteczek wody w kompleksie zmniejsza ilość par jonowych skompensowanych wewnętrznie. Wyniki te pokazują, że wiązania wodorowe między PE a cząsteczkami wody mają również wpływ na ich ruchliwość, a ta determinuje strukturę i właściwości KPE. W pracy H8 Habilitant zbadał zmiany struktury drugorzędowej wybranych polipeptydów, związane ze zmianą stopnia jonizacji oraz przeprowadził walidację wybranych pól siłowych. Wyniki otrzymane dla trzech różnych pól siłowych zostały zweryfikowane eksperymentalnie, co pokazało że tylko dla jednego z nich uzyskuje się poprawny (zgodny z eksperymentem) opis zmian konformacyjnych związanych ze zmianą stopnia jonizacji.

Uważam, że dr Piotr Batys wykonał bardzo dobrze zaplanowane prace, w których był odpowiedzialny za obliczenia metodą dynamiki molekularnej, świadczące o gruntownej znajomości podejścia teoretycznego i modelowania do opisu wyników badań eksperymentalnych. Dało to możliwość opracowania solidnych i niespotykanych na szerszą skalę podstaw do wyjaśnienia mechanizmów kształtujących właściwości kompleksów polielektrolitów na poziomie molekularnym.

Działalność popularyzująca naukę

Habilitant brał czynny udział w Festiwalach Nauki w Krakowie w latach 2011-2014 oraz w Dniach Otwartych Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN w latach 2011-2015 oraz 2019.

Działalność dydaktyczna dr. Piotra Batysa

Dr Piotr Batys, jako osoba zatrudniona w Instytucie PAN nie miał możliwości prowadzenia dydaktyki w jednostce macierzystej, ale miał okazję do nadzorowania dyplomantów i doktorantów, angażowania się w ich prace naukowe w czasie, gdy przebywał na stażu w Uniwersytecie Aalto. Dotyczyło to czworga doktorantów (publikacje przez nich opublikowane mają dr Batysa jako współautora) oraz czworga magistrantów.

Działalność organizacyjna dr. Piotra Batysa

W przedstawionych mi do oceny materiałach nie ma informacji o działalności organizacyjnej, rozumianej jako pełnienie funkcji w macierzystej jednostce, co jest zrozumiałe, gdyż większość czasu, przypadającego na okres po doktoracie Habilitant spędził na stażach zagranicznych. Jednak istotnym elementem organizacji badań naukowych jest pozyskiwanie funduszy na ich prowadzenie. Tu Habilitant zabiega z sukcesem o uzyskanie finansowania aplikując i pozyskując granty z NCN: w latach 2019 – 2022 – kieruje grantem SONATA: „Od pojedynczej cząsteczki do inteligentnego materiału - zrozumienie tworzenia się i właściwości kompleksów polipeptydów” a w latach 2019 – 2020 kierował grantem MINIATURA : „Physicochemical characterization of stimuli-responsive smart-materials”.

Uważam, że przedstawiony do oceny komentarz i cykl publikacji jest jednolitym tematycznie dziełem o wysokim poziomie naukowym, a jego Autor posiada kwalifikacje niezbędne do prowadzenia samodzielnych prac badawczych. Doceniając poziom prac, wyniki uzyskane przez Autora, ich opublikowanie w prestiżowych czasopismach z dziedziny chemii, fizykochemii polimerów i chemii fizycznej, stwierdzam, że przedłożona mi do oceny praca spełnia warunki określone w ustawie o stopniach i tytule naukowym i uprzejmie proszę Radę Naukową Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk o dopuszczenie dr. Piotra Batysa do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

15.06.2021



Prof. dr hab. inż. Andrzej W. Trochimczuk