Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera
Polskiej Akademii Nauk
ul. Niezapominajek 8
30-239 Kraków, Polska
(nazwa i dane adresowe podmiotu habilitującego,
wybranego do przeprowadzenia postępowania)

za pośrednictwem:
Rady Doskonałości Naukowej
pl. Defilad 1
00-901 Warszawa
(Pałac Kultury i Nauki, p. XXIV, pok. 2401)

Piotr Aleksander Batys
(imię i nazwisko wnioskodawcy)

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera
Polskiej Akademii Nauk
ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków, Polska
(miejsce pracy/jednostka naukowa)

Wniosek

z dnia 26 października 2020

o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie **nauk ścisłych i przyrodniczych** w dyscyplinie **nauki chemiczne**

Określenie osiągnięcia naukowego będącego podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia i właściwości kompleksów polielektrolitów

Wnioskuję – na podstawie art. 221 ust. 10 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2018 r. poz. 1668 ze zm.) – aby komisja habilitacyjna podejmowała uchwałę w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w głosowaniu **tajnym**

Zostałem poinformowany, że:
Administratorem w odniesieniu do danych osobowych pozyskanych w ramach postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego jest Przewodniczący Rady Doskonałości Naukowej z siedzibą w Warszawie (pl. Defilad 1, XXIV piętro, 00-901 Warszawa).
Kontakt za pośrednictwem e-mail: kancelaria@rdn.gov.pl, tel. 22 656 60 98 lub w siedzibie organu. Dane osobowe będą przetwarzane w oparciu o przesłankę wskazaną w art. 6 ust. 1 lit. c) Rozporządzenia UE 2016/679 z dnia z dnia 27 kwietnia 2016 r. w związku z art. 220 - 221 oraz art. 232 – 240 ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, w celu przeprowadzenie postępowania o nadanie stopnia doktora habilitowanego oraz realizacji praw i obowiązków oraz środków odwoławczych przewidzianych w tym postępowaniu.
Szczegółowa informacja na temat przetwarzania danych osobowych w postepowaniu dostepna jest na stronie www.rdn.gov.pl/klauzula-informacyjna-rodo.html

[redacted]
.....
(podpis wnioskodawcy)

Załączniki:

1. Dane wnioskodawcy (Załącznik 1)
2. Kopia dokumentu potwierdzająca posiadanie stopnia doktora (Załącznik 2)
3. Autoreferat (Załącznik 3)
4. Wykaz osiągnięć naukowych stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny (Załącznik 4).
5. Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego (Załącznik 5)
6. Oświadczenia współautorów określające ich udział w publikacjach (Załącznik 6)

AUTOREFERAT

1. Imię i nazwisko.

Piotr Aleksander Batys

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe lub artystyczne – z podaniem podmiotu nadającego stopień, roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej.

Magister inżynier, **2010**
w zakresie specjalności: Proekologiczne technologie nieorganiczne
na kierunku: Technologia chemiczna
Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Kraków
Tytuł pracy magisterskiej: „Otrzymywanie porowatych tworzyw z proszków metali w procesie spiekania pod ciśnieniem – wpływ parametrów prasowania na kinetykę procesu utleniania wytworzonych materiałów"
Promotor: dr inż. Artut Jaroń

Doktor nauk chemicznych w zakresie Chemii, **2015**
Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk (IKiFP PAN), Kraków
Tytuł pracy doktorskiej: „Surface and transport properties of nanoparticle multilayers"
Promotor: dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN

3. Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych.

[10.2010 – **10.2015]** – Interdyscyplinarne Studia Doktoranckie „Zaawansowane Materiały dla Nowoczesnych Technologii i Energetyki Przyszłości", Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk w Krakowie, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej AGH w Krakowie oraz Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk w Krakowie.

[10.2015 – 01.2019] – specjalista, IKiFP PAN, grupa badawcza „Koloidy" (prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk)

[03.2016 – 08.2018] – staż podoktorski, Department of Chemistry and Materials Science, School of Chemical Engineering, Aalto University, Finland

[09.2017 – 08.2018] – staż podoktorski, Department of Bioproducts and Biosystems, School of Chemical Engineering, Aalto University, Finland

[02.2019 – obecnie] – adiunkt, IKiFP PAN, grupa badawcza „Koloidy" (prof. dr hab. Zbigniew Adamczyk)

4. Omówienie osiągnięć, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 Ustawy.

Osiągnięciem naukowym, wynikającym z art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. 2018 poz. 1668) jest cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach naukowych.

4.1. Tytuł osiągnięcia naukowego

Określenie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia i właściwości kompleksów polielektrolitów

4.2. Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe (✉ - autor korespondencyjny)

H1. P. Batys✉, S. Luukkonen, M. Sammalkorpi, "Ability of the Poisson–Boltzmann Equation to Capture Molecular Dynamics Predicted Ion Distribution Around Polyelectrolytes", Phys. Chem. Chem. Phys, 19 (2017) 24583-24593
(IF = **3,906**, 5-letni IF: 4,224, punkty MNiSW: **100**), liczba cytowań **14** (bez autocytowań 8)

Mój udział w powstanie tej pracy polegał na współudziale w koncepcji pracy, zaplanowaniu symulacji metodą dynami molekularnej (MD), przygotowanie plików wejściowych dla magistrantki (Sohvi Luukkonen), analizie i interpretacji danych otrzymanych z symulacji komputerowych. W oparciu o raport stażystki napisałem manuskrypt a także przygotowałem wszystkie rysunki, wykresy i tabele. Ponadto, pełniłem rolę autora korespondencyjnego a także odpowiedziałem na pytania recenzentów i przygotowałem końcową wersję publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 60%.

H2. Z. Adamczyk, M. Morga✉, D. Kosior, **P. Batys**, "Conformations of Poly-L-lysine Molecules in Electrolyte Solutions: Modeling and Experimental Measurements", J. Phys. Chem. C, 122 (2018) 23180-23190
(IF = **4,309**, 5-letni IF: 4,537, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **7** (bez autocytowań 5)

Mój wkład w powstanie tej publikacji obejmował całokształt pracy związanej z modelowaniem metodą MD, w tym zaplanowanie i przeprowadzenie symulacji, analiza i interpretacja otrzymanych danych, a także opis części poświęconej metodzie MD oraz wyników i dyskusji związanej z otrzymanymi wynikami. Przygotowałem również wykresy nr. 1, 2, 3, 4, tabele nr. 1 i 2, oraz abstrakt graficzny. Mój udział procentowy szacuję na 25%.

H3. Y. Zhang, **P. Batys**, J.T. O'Neal, F. Li, M Sammalkorpi✉, J.L. Lutkenhaus✉, "The Molecular Origin of the Glass Transition in Polyelectrolyte Assemblies", ACS Cent. Sci, 4 (2018) 638-644
(IF = **12,837**, 5-letni IF: 13,180, punkty MNiSW: **200**), liczba cytowań **38** (bez autocytowań 33)

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował współudział w stworzeniu koncepcji pracy, zaplanowanie i przeprowadzenie modelowania metodą MD a także interpretację otrzymanych wyników. Napisałem części manuskryptu związane z wynikami otrzymanymi przeze mnie a także przygotowałem wykresy nr. 4, 5, S1, S2, S8, S9, S10 oraz tabele S1 i S2. Opracowałem również odpowiedzi na pytania recenzentów dotyczące metody MD i otrzymanych przeze mnie wyników. Mój udział procentowy szacuję na 30%.

H4. P. Batys, Y. Zhang, J.L. Lutkenhaus✉, M Sammalkorpi✉, "Hydration and Temperature Response of Water Mobility in Poly(diallyldimethylammonium)–Poly(sodium 4-styrenesulfonate) Complexes", Macromolecules , 51 (2018) 8268–8277
(IF = **5,997**, 5-letni IF: 5,629, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **8** (bez autocytowań 4)

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował stworzenie koncepcji pracy, zaplanowanie i przeprowadzenie modelowania metodą MD a także analiza i interpretacja otrzymanych wyników. Ponadto, miałem współudział w zaplanowaniu badań eksperymentalnych, mających na celu weryfikacje wyników teoretycznych. Napisałem manuskrypt a także przygotowałem wszystkie rysunki i tabele z wyłączeniem Rys. 2a, przedstawiającego wyniki eksperymentalne. Mój udział procentowy szacuję na 70%.

H5. P.C. Suarez-Martinez, **P. Batys**, M. Sammalkorpi✉, J.L. Lutkenhaus✉, "Time-Temperature and Time-Water Superposition Principles Applied to Poly(allylamine)/Poly(acrylic acid) Complexes", Macromolecules, 52 (8) (2019) 3066-3074
(IF = **5,918**, 5-letni IF: 5,654, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **11** (bez autocytowań 9)

Mój wkład w powstanie pracy obejmował zaplanowanie i przeprowadzenie symulacji metodą dynamiki molekularnej oraz analiza i interpretacja otrzymanych danych a także opis części poświęconej metodzie MD oraz wniosków i dyskusji związanej z wynikami otrzymanymi tą metodą. Przygotowałem także wykresy nr. 6, S2, S10, S11 oraz tabelę S5. Mój udział procentowy szacuję na 35%.

H6. A. Michna✉, **P. Batys**, M. Morga, A. Pomorska, M. Wytrwal-Sarna, M. Kepczynski, Z. Adamczyk, "Formation of Strong Polycation (Poly[(3-allylamino-2- hydroxypropyl) trimethylammonium chloride]) Monolayers on Mica, Silica, and Gold Substrates: Modeling and Experimental Studies", J. Phys. Chem. C, 123 (2019) 19022-19032
(IF = **4,189**, 5-letni IF: 4,404, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **2** (bez autocytowań 1)

Mój wkład w powstanie tej publikacji obejmował całokształt pracy związanej z modelowaniem metodą MD, w tym zaplanowanie i przeprowadzenie symulacji, analiza i interpretacja otrzymanych danych, a także opis części poświęconej metodzie dynamiki molekularnej oraz wyników i dyskusji związanej z otrzymanymi wynikami. Przygotowałem również wykresy nr. 1, 2, S1, S2, oraz S3. Mój udział procentowy szacuję na 20%.

H7. P. Batys✉, S. Kivisto, S.M. Lalwani, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, "Comparing Water-Mediated Hydrogen-Bonding in Different Polyelectrolyte Complexes", Soft Matter, 15 (2019) 7823 – 7831
(IF = **3,140**, 5-letni IF: 3,466, punkty MNiSW: **100**), liczba cytowań **4** (bez autocytowań 2)

Moje zaangażowanie w powstanie tej publikacji obejmowało, współudział w stworzeniu koncepcji pracy, zaplanowanie i przygotowanie plików startowych do symulacji metodą MD dla stażysty (Samu Kivisto), pomoc w analizie i interpretacji danych z symulacji komputerowych, a także przygotowanie wszystkich rysunków, wykresów i tabel dotyczących wyników modelowania MD oraz abstraktu graficznego, napisanie i wysłanie manuskryptu (rola autora korespondencyjnego) oraz odpowiedzi na recenzje. Mój udział procentowy szacuję na 60%.

H8. P. Batys✉, M. Morga, P. Bonarek, M. Sammalkorpi, "pH-Induced Changes in Polypeptide Conformation: Force-Field Comparison with Experimental Validation", J. Phys. Chem. B, 124 (2020) 2961-2972
(IF = **2,857**, 5-letni IF: 2,880, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **0**

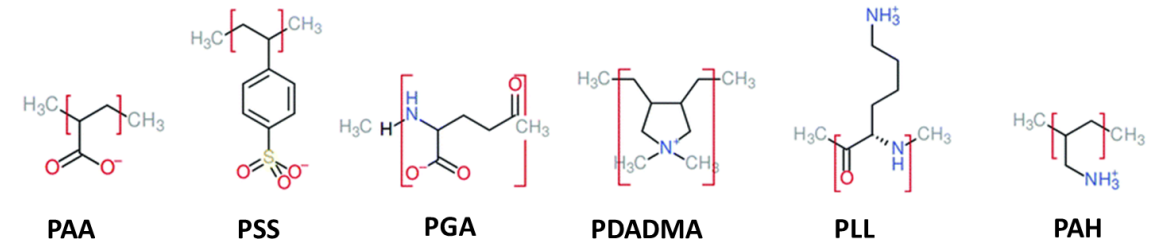
Mój udział w powstaniu tej publikacji obejmował stworzenie koncepcji pracy oraz całokształt pracy związanej z modelowaniem metodą MD, w tym zaplanowanie i przeprowadzenie symulacji, analiza i interpretacja otrzymanych danych, a także napisanie i wysłanie manuskryptu (rola autora korespondencyjnego) oraz odpowiedzi na recenzje. Brałem również udział w planowaniu badań eksperymentalnych oraz przeprowadziłem analizę wyników otrzymanych z dichroizmu kołowego. Przygotowałem również wykresy nr. 1, 3, 4, S1, S3, S4, S5 oraz tabele 1, 3, 4, S5 a także abstrakt graficzny. Mój udział procentowy szacuję na 55%.

Oryginalne prace wraz z Supporting Information zebrane są w Załączniku 5. Oświadczenia wszystkich współautorów określające indywidualny wkład każdego z nich w powstanie każdej z prac zebrano w Załączniku 6.

Sumaryczny IF cyklu prac zgodnie z rokiem ich opublikowania wynosi **41,153**. Suma punktów MNiSW, według ujednoliconego wykazu czasopism punktowanych, wynosi **1100**. Liczba cytowań cyklu publikacji, według bazy Scopus, wynosi **84** (bez autocytowań **62**) (*dane na dzień 25.10.2020*). Podane wskaźniki IF oraz punkty MNiSW są zgodne z rokiem ukazania się publikacji.

4.3. Omówienie osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę habilitacji

Polielektrolity (PE) to polimery zawierające jonowe lub ulegające jonizacji grupy funkcyjne. W roztworze wodnym grupa funkcyjna polielektrolitu dysocjuje na przeciwjon oraz rdzeń posiadający ładunek elektrostatyczny. Samoorganizacja PE mających przeciwne ładunki prowadzi do powstania kompleksów polielektrolitów (KPE). Szerokie zainteresowanie KPE wiąże się z możliwością kontrolowania ich właściwości,[1] za pomocą odpowiedniego doboru warunków formowania, takich jak pH, siła jonowa oraz rodzaj czy stężenie PE. Dlatego istotne jest zrozumienie na poziomie molekularnym zachowania polielektrolitów w roztworach wodnych w funkcji tych parametrów.[2,3] Dodatkowo, można wpływać na właściwości KPE poprzez późniejszą modyfikację otrzymanych materiałów, taką jak suszenie/uwodnienie, obróbka termiczna, wymiana jonowa lub funkcjonalizacja.[4–8] W niniejszej pracy skupiłem się na poniższych PE, stosowanych często w badaniach eksperymentalnych i w zastosowaniach praktycznych (Rys. 1).



Polianiony (–):

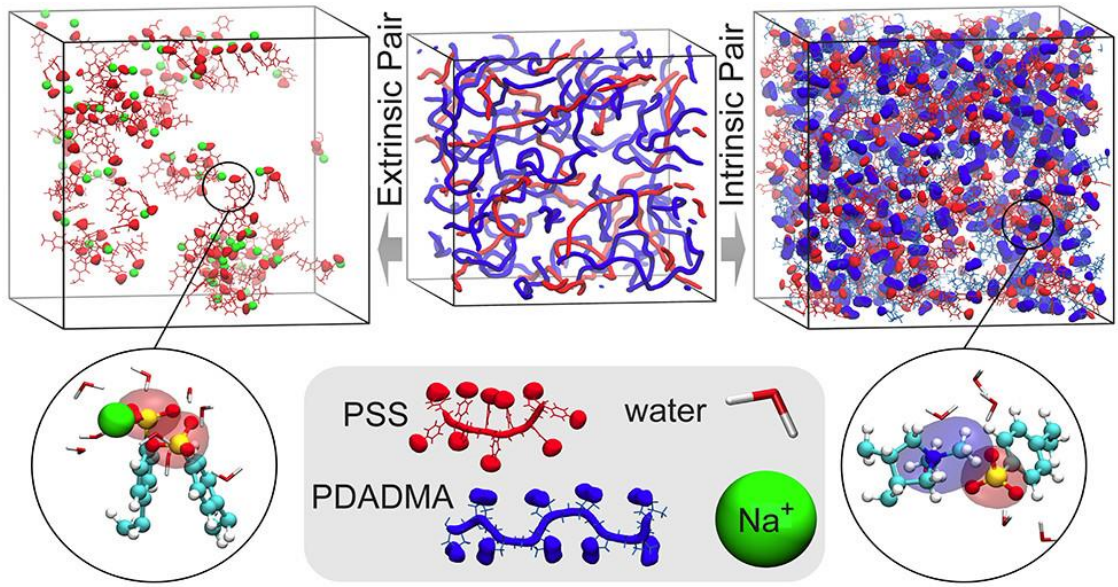
PAA – poli(kwas akrylowy)
PSS – poli(4-styrenosulfonian sodu)
PGA –poli(kwas L-glutaminowy)

Polikationy (+):

PDA – poli(chlorek diallilodimetyloamoniowy)
PLL – poli(L-lizyna)
PAH – poli(chlorowodorek alliloaminy)

Rysunek 1. Struktury chemiczne monomerów badanych polielektrolitów oraz wyjaśnienie stosowanych akronimów.

KPE są materiałami o interesujących właściwościach fizykochemicznych, szczególnie przewodnictwie elektrycznym a także właściwościach mechanicznych i termicznych.[9–12] Właściwości termiczne są szczególnie istotne, ponieważ KPE zawierające wodę, w określonej temperaturze stają się bardziej plastyczne. Proces ten jest często nazywany w literaturze „przemianą szklistą" a temperatura w której zachodzi „temperaturą zeszklenia (T_g)".[2,6,12–17] Zjawiska zachodzące podczas przemiany szklistej w układach KPE są przedmiotem trwających badań naukowych oraz dyskusji. Przemiana szklista wykazuje cechy przejścia fazowego drugiego rzędu, ponieważ zmiana pojemności cieplnej jest nieciągła, jednak na ogół nie uważa się jej za przemianę termodynamiczną ze względu na trudność w osiągnięciu stanu równowagi KPE. Niemniej jednak, przemiana szklista i wynikająca z niej zmiana właściwości mechanicznych umożliwia zastosowanie KPE jako materiałów reagujących na zmianę temperatury.[1,13,14]



Rysunek 2. Schemat struktury kompleksu PDADMA-PSS o stopniu uwodnienia 30% wag. otrzymany z modelowania metodą MD, ukazujący pary jonowe skompensowane wewnętrznie (ang. intrinsic pair) oraz zewnętrznie (ang. extrinsic pair) wraz z otaczającymi je cząsteczkami wody.**[H3]**

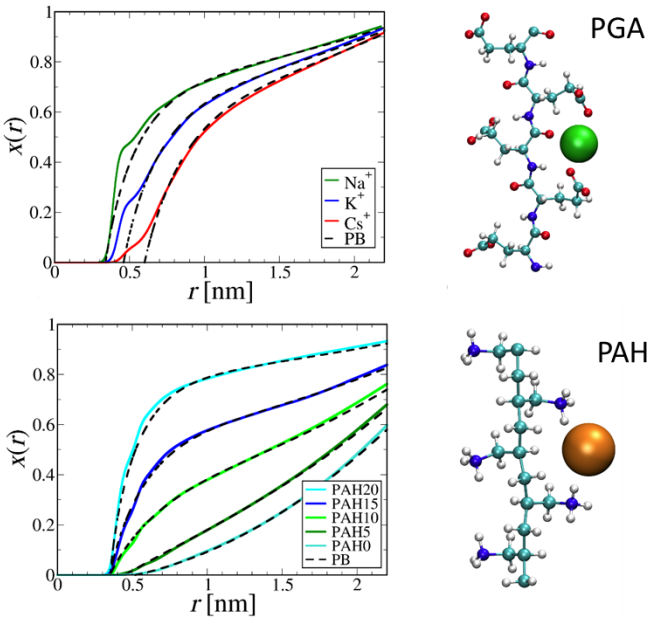
Schemat struktury KPE przedstawiłem na Rys. 2, dla kompleksu PDADMA-PSS.**[H3]** Polikationy i polianiony łącząc się, tworząc pary jonowe skompensowane wewnętrznie, a pozostałe naładowane grupy funkcyjne PE są kompensowane przez przeciwjony, tworząc pary jonowe skompensowane zewnętrznie. Ponieważ formowanie odbywa się w środowisku wodnym, cząsteczki wody otaczają pary jonowe tworząc warstwę hydratacyjną. Ilość oraz stabilność poszczególnych par jonowych (skompensowanych wewnętrznie lub zewnętrznie) determinuje m.in., temperaturę zeszklenia oraz właściwości reologiczne. Pomimo znaczenia par jonowych w KPE, brak w literaturze systematycznych badań łączących warunki procesu ich formowania z właściwościami pojedynczych PE a także zrozumienia procesów zachodzących w KPE na poziomie molekularnym. Można oczekiwać, że uzupełnienie powyższych braków w stanie wiedzy znacząco ułatwi precyzyjne kontrolowanie właściwości tych materiałów.

Wobec powyższego, głównym celem badań przedstawionych w pracach stanowiących cykl habilitacyjny, była charakterystyka fizykochemiczna polielektrolitów w roztworach oraz wyjaśnienie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia KPE oraz ich właściwości fizykochemicznych.

Zrozumienie tych zjawisk w skali molekularnej przy użyciu wyłącznie metod eksperymentalnych nie jest możliwe. Dlatego też, użytecznym i komplementarnym narzędziem może być modelowanie teoretyczne. Podstawową metodą, którą wykorzystałem w mojej pracy była dynamika molekularna (MD) z rozdzielczością atomową. Metoda ta polegająca na numerycznym rozwiązywaniu równań ruchu Newtona, służy do analizy ruchów atomów i cząsteczek, dając obraz dynamicznej ewolucji układu. Rozwój pól siłowych, tj. zbiorów funkcji oraz zespołu parametrów stanowiących przybliżenie realnych oddziaływań pomiędzy atomami, wraz ze stale rosnącą mocą obliczeniową i wydajnością oprogramowania sprawia, że modelowanie molekularne stało się efektywnym narzędziem umożliwiającym poznanie struktury oraz oddziaływań na poziomie molekularnym. Modelowanie MD stanowi również nieocenioną pomoc w interpretacji wyników eksperymentalnych, pozwalającą na określenie molekularnych mechanizmów procesów fizykochemicznych.

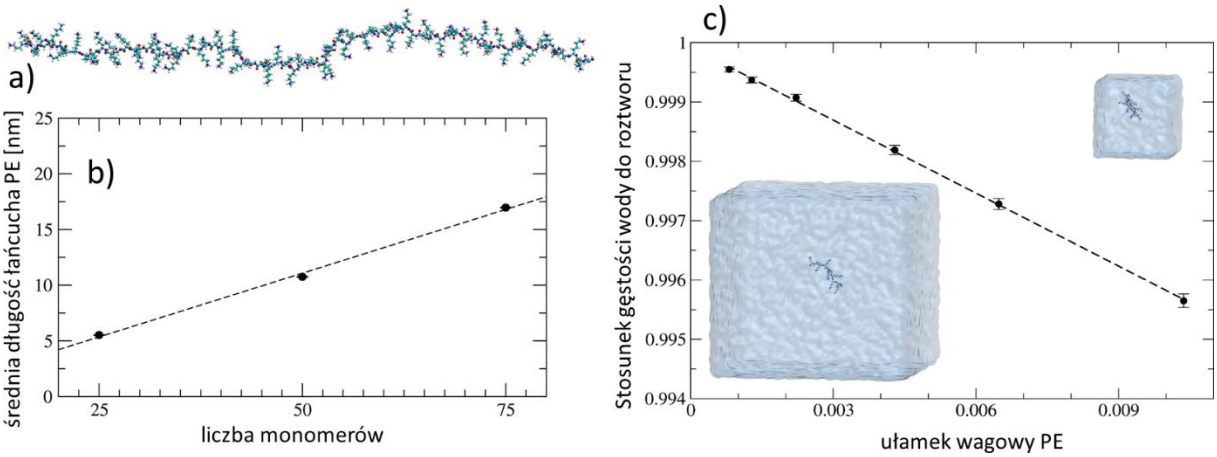
Na osiągnięcie naukowe składa się osiem oryginalnych prac naukowych, w których:

- określiłem wpływ rodzaju grupy funkcyjnej PE, rodzaju przeciwjonu oraz pH na stopień kondensacji jonowej,**[H1]**
- opracowałem procedury wyznaczania parametrów fizykochemicznych PE w roztworach elektrolitów, takich jak gęstość, długość, średnica, konformacja łańcucha a także jego efektywny ładunek,**[H2, H6]**
- określiłem zmiany w strukturze drugorzędowej wybranych polipeptydów, związane ze zmianą stopnia jonizacji oraz przeprowadziłem walidację wybranych pól siłowych,**[H8]**
- wykazałem kluczowy wpływ wiązań wodorowych na właściwości par jonowych skompensowanych wewnętrznie a także na strukturę KPE,**[H7]**
- określiłem wpływ stopnia uwodnienia KPE oraz temperatury na dynamikę molekuł wody w KPE **[H4]** oraz ilość par jonowych skompensowanych wewnętrznie,**[H5]**
- określiłem granice stosowalności zasady superpozycji do opisu właściwości reologicznych KPE,**[H5]**
- wyjaśniłem molekularny mechanizm przejścia szklistego w uwodnionych KPE.**[H3]**



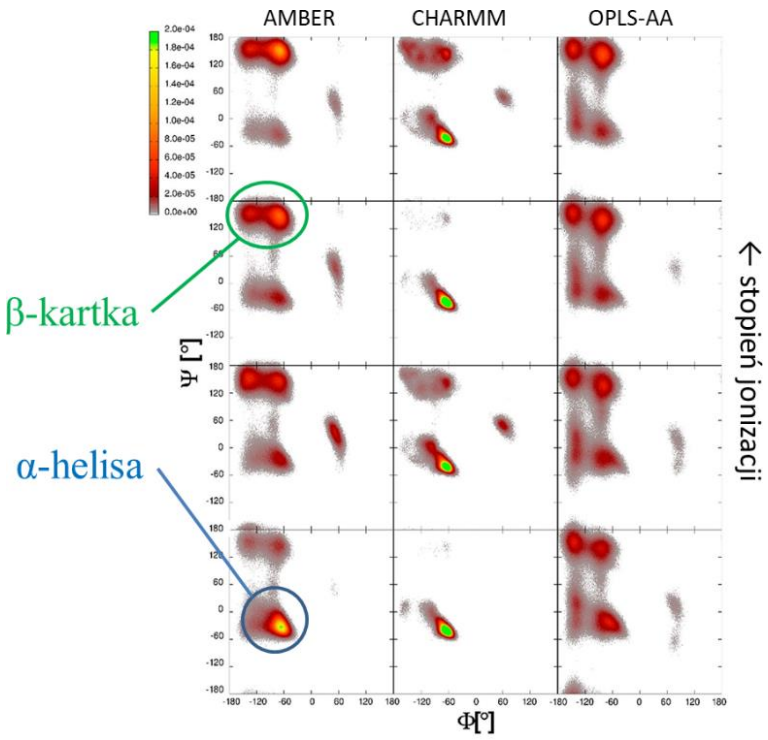
Rysunek 3. Ułamek molowy przeciwjonów w funkcji odległości od rdzenia PE wyznaczony z modelowania MD (linie ciągłe), obliczony ze zmodyfikowanego modelu Poissona-Boltzmanna (linie przerywane) oraz przykładowa konformacja łańcucha PE wraz z przeciwjonem, dla PGA oraz PAH o różnym stopniu jonizacji.**[H1]**

W zależności od rodzaju PE i przeciwjonów, a także właściwości roztworu, szczególnie pH oraz stężenia elektrolitu, jony solwatowane mogą kondensować na łańcuchach PE. Stopień kondensacji jonowej oraz jej wpływ na odziaływania PE-PE, a także na ilość powstających par jonowych podczas formowania kompleksu, odgrywa kluczową rolę w określaniu właściwości KPE. W pracy **[H1]** opisałem mechanizm kondensacji jonowej dla szeregu polielektrolitów oraz określiłem wpływ rodzaju przeciwjonu oraz pH na to zjawisko. Wykazałem, że zmodyfikowane równanie Poissona-Boltzmanna (PB), które uwzględnia efektywny promień PE oraz energię oddziaływań specyficznych przeciwjonów, opisuje dokładnie rozkład jonów na dużych odległościach. W rezultacie, zmodyfikowany model PB poprawnie opisuje kondensację jonów pod względem zarówno promienia Manninga jak i ułamka skondensowanych przeciwjonów dla wszystkich badanych PE oraz przeciwjonów (Rys. 3). Natomiast dla małych odległości od rdzenia PE, zwłaszcza w przypadku silnie zlokalizowanego ładunku lub specyficznego miejsca wiązania jonów, model ciągły PB zawodzi. Pokazałem również, że grubości warstwy jonów skondensowanych układają się na pojedynczej krzywej dla wszystkich badanych jednowartościowych jonów (Na^+, Br^+, Cs^+, Cl^- i Br^-) i PE w funkcji parametru Manninga, a w konsekwencji liniowej gęstości ładunku PE. Znaczenie tego faktu polega na tym, że w przeciwieństwie do promienia Manninga wyznaczonego z modelu PB, grubość warstwy skondensowanej otrzymana w modelowaniu MD nie zależy od rodzaju PE lub typu przeciwjonu. Uzyskane wyniki bezpośrednio przyczyniają się do lepszego zrozumienia zjawiska kondensacji jonowej oraz stanowią narzędzie teoretyczne do opisu rozkładu jonów wokół PE, a także innych naładowanych makrocząsteczek w roztworach wodnych.



Rysunek 4. (a) Konformacja łańcucha PLL zawierającego 75 monomerów. (b) Średnia długość łańcucha PLL w funkcji ilości monomerów oraz (c) stosunek gęstości czystego roztworu elektrolitu do gęstości roztworu PLL w funkcji ułamka wagowego – stanowiący podstawę procedury do wyznaczania gęstości PE.**[H2]**

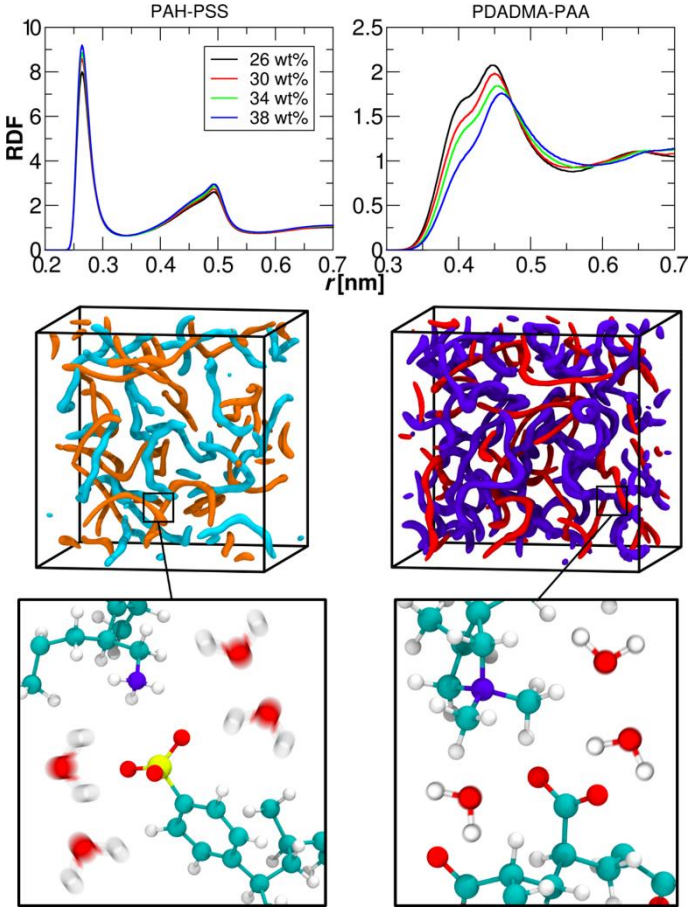
Znajomość podstawowych parametrów fizykochemicznych PE w roztworach, przede wszystkim konformacji PE, długości oraz średnicy łańcucha a także efektywnego ładunku jest niezbędna do ilościowego opisu oraz zrozumienia procesu ich adsorpcji, która jest podstawowym procesem wykorzystywanym do produkcji mono- i wielowarstw PE.[18] W pracach **[H2, H6]** wyznaczyłem konformacje, gęstość, średnicę oraz długość łańcucha wybranych PE, a także ich efektywny ładunek w roztworze. Procedura umożliwiającą wyznaczenie gęstości makrocząstek (Rys. 4), opierająca się na eksperymentalnej metodzie rozcieńczeń, pozwala uwzględnić efekty hydratacji a jej zgodność z wynikami eksperymentalnymi jest rzędu 1%. Wykazałem również, że dla PLL w warunkach niskiej siły jonowej, średnia długość łańcucha PE zależy liniowo od ilości monomerów. Umożliwia to wyznaczenie długości pojedynczego monomeru oraz ekstrapolację otrzymanych wyników do dłuższych łańcuchów PE, np. pozwala to obliczyć długość konturu PE o zadanej masie molowej. Ponadto, w pracy **[H6]** wykazałem, że funkcjonalizacja PAH w reakcji z chlorkiem glicydylotrimetyloamoniowym, która zwiększa biokompatybilność PE, może powodować tworzenie się wiązań wodorowych między monomerami co wpływa na stabilizację konformacji oraz wydłużenie średniej odległość końców łańcucha. Wykorzystując model PB, określiłem także promień Manninga zmodyfikowanego PAH a także wyznaczyłem jego gęstość oraz efektywny ładunek.



Rysunek 5. Wykresy Ramachandrana dla cząsteczki PLL otrzymane z modelowania MD. Wykresy cząstkowe pokazują rozkład kątów torsyjnych Ψ i Φ łańcucha peptydowego dla różnych stopni jonizacji, otrzymane z użyciem pól siłowych OPLS-AA, CHARMM27 oraz AMBER99SB*-ILDNP.**[H8]**

Polipeptydy PLL i PGA stanowią szczególną klasę PE podatną na zmiany pH, powodujące zmianę stopnia jonizacji oraz struktury drugorzędowej. Udział struktury drugorzędowej β oraz α-helisy jest istotny dla formowania KPE, gdyż wpływa on na właściwości mechaniczne otrzymanych materiałów.[19] W pracy **[H8]** określiłem zmiany w strukturze drugorzędowej PLL i PGA wywołane zmianą stopnia jonizacji. Modelowanie przeprowadziłem stosując trzy różne pola siłowe tj. OPLS-AA, CHARMM27 i AMBER99SB*-ILDNP, a otrzymane wyniki zweryfikowałem w oparciu o dane eksperymentalne. Pole siłowe AMBER99SB*-ILDNP opiera się na obliczeniach mechaniki kwantowej fazy skondensowanej, oraz zawiera parametry uzyskane z dopasowania eksperymentalnych czasów korelacji i sprzężeń J (NMR). Parametry wiązań, kątów, kątów dwuściennych oraz oddziaływań van der Waalsa są podobne w polach siłowych AMBER99SB*-ILDNP i CHARMM27. Jednak, w polu siłowym CHARMM27, cząstkowe ładunki na atomach zostały uzyskane z kwantowo-chemicznych obliczeń oddziaływań między związkami modelowymi a wodą. Natomiast, parametry pola siłowego OPLS zostały zoptymalizowane w odniesieniu do właściwości eksperymentalnych cieczy organicznych, takich jak gęstość i ciepło parowania. Szczegółowe procedury parametryzacji, oraz dokładna postać funkcjonałów opisane są w Ref.[20] Pomimo tego, że wszystkie wybrane pola siłowe są często używane do modelowania zarówno białek jak i polipeptydów, zaobserwowałem znaczące różnice pomiędzy nimi (Rys. 5). Tylko użycie jednego z badanych pól siłowych, AMBER99SB*-ILDNP, umożliwiało poprawny opis zmian konformacyjnych związane ze zmianą stopnia jonizacji. Zarówno dla PLL jak i PGA zawartość α-helisy jest systematycznie zawyżana przy użyciu pola CHARMM27, podczas gdy pole OPLS-AA zawyża udział struktury β przy niższych stopniach jonizacji w stosunku do udziału otrzymanego eksperymentalnie przy użyciu metody dichroizmu kołowego. Dla najwyższego badanego

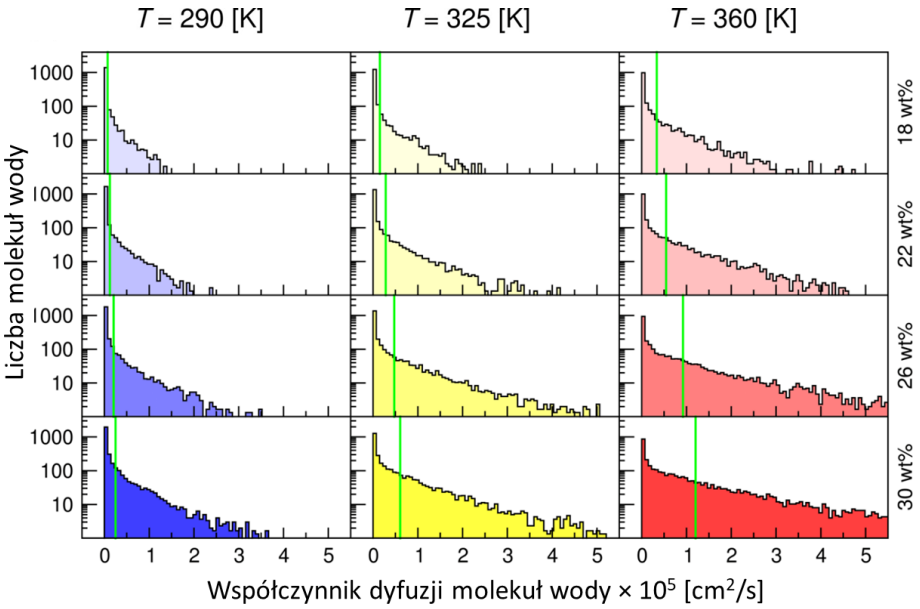
stopnia jonizacji PE, udziały struktury drugorzędowej przewidywane przez OPLS-AA są najbliższe rozkładowi wyznaczonemu eksperymentalnie. Otrzymane przeze mnie wyniki stanowią istotną wskazówkę dla dalszych badań teoretycznych nad tymi układami a także zwracają uwagę na możliwość precyzyjnej kontroli struktury drugorzędowej za pomocą pH.



Rysunek 6. Funkcja rozkładu radialnego (RDF) dla grup funkcyjnych PE w kompleksach PAH-PSS oraz PDADMA-PAA o różnym stopniu uwodnienia, w temperaturze 290 K. Poniżej, ilustracje KPE otrzymanych w modelowaniu MD, oraz pary jonowej skompensowanej wewnętrznie.**[H7]**

Molekuły wody ułatwiają ruch łańcucha PE, zwiększają objętość swobodną oraz ekranują oddziaływania elektrostatyczne w KPE, wpływając na właściwości termiczne i mechaniczne otrzymywanych materiałów.[13] W artykule **[H7]** określiłem, na przykładzie kompleksów PAH-PSS oraz PDADMA-PAA, wpływ cząsteczek wody oraz wiązań wodorowych pomiędzy cząsteczką wody a grupą funkcyjną PE na stabilność par jonowych skompensowanych wewnętrznie. Wyznaczyłem również ilościowo wpływ temperatury i stopnia uwodnienia KPE na to zjawisko. Potwierdziłem, że trwałość par jonowych między polielektrolitami jest związana z ich zdolnością do tworzenia wiązań wodorowych z cząsteczkami wody. W przypadku kompleksu PDADMA-PAA, zwiększenie ilości cząsteczek wody w kompleksie obniża ilość par jonowych skompensowanych wewnętrznie (Rys. 6). Wyniki te pokazują, że wiązania wodorowe między PE a cząsteczkami wody mają również wpływ na ich ruchliwość, która z kolei determinuje strukturę i właściwości KPE. Zaobserwowałem dziesięciokrotną różnicę w wartości średniego współczynnika dyfuzji cząsteczek wody między kompleksami PAH-PSS i PDADMA-PAA przy tym samym stopniu uwodnienia. Wykazałem również, że

wpływ temperatury na wiązanie wodorowe zależy od rodzaju PE, np. dla PAA wiązanie to jest mniej wrażliwe na zmiany temperatury, niż dla PSS. Różnice w strukturze kompleksów PDADMA-PAA i PAH-PSS przewidziane w modelowaniu MD zostały potwierdzone eksperymentalnie. Otrzymane przeze mnie wyniki sugerują, że wstępne przewidywania struktury oraz zdolności do wiązania cząsteczek wody przez KPE mogą opierać się na rozważaniach na poziomie molekularnym, np. analizie funkcji korelacyjnych pomiędzy grupami PE.

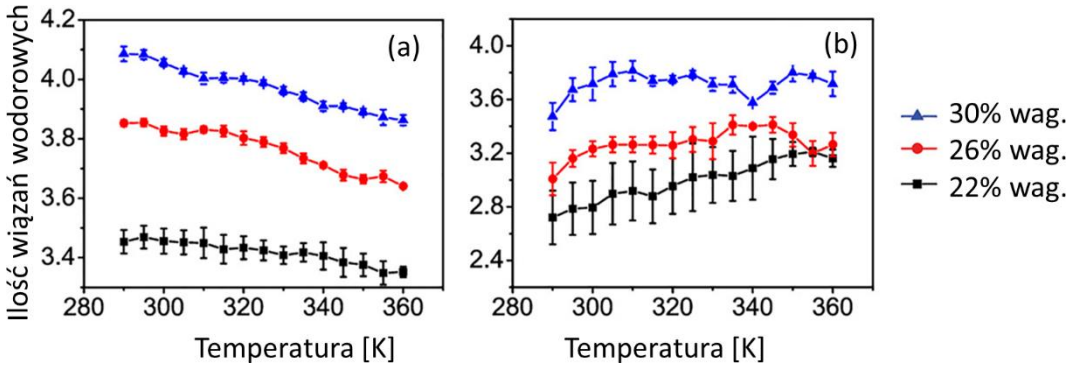


Rysunek 7. Histogramy współczynnika dyfuzji cząsteczek wody w kompleksach PDADMA-PSS o stężeniu wagowym wody 18-30%. Pionowe zielone linie oznaczają wartość średnią współczynnika dyfuzji.**[H4]**

Ze względu na silne oddziaływanie z grupami funkcyjnymi zdecydowana większość cząsteczek wody w KPE jest immobilizowana, zarówno w kompleksach PAH-PSS, PDADMA-PAA **[H7]** jak i PDADMA-PSS.**[H4]**. Dla tego ostatniego kompleksu wykazałem, że przy małym stopniu uwodnienia KPE lub w niskich temperaturach, dominującym czynnikiem są ruchy rotacyjne cząsteczek wody. Zwiększenie temperatury lub stężenia cząsteczek wody zwiększało znacząco ruchy translacyjne. Otrzymane przeze mnie wyniki teoretyczne zostały potrwierdzone eksperymentalnie przy użyciu skaningowej kalorymetrii różnicowej pokazując, że w uwodnionych KPE silnie związane cząsteczki wody dominują. Również wartości współczynników dyfuzji obliczone teoretycznie zostały potwierdzone w późniejszych badaniach eksperymentalnych dla analogicznego układu przy użyciu metody ^{1}H NMR.[21]

Innym istotnym wynikiem jest wykazanie wpływu stopnia uwodnienia i temperatury na ruchliwość molekuł wody **[H4]** oraz ruchliwość PE.**[H5]** Modelowanie wykazało, że rozkład współczynnika dyfuzji cząsteczek wody zależy od stopnia uwodnienia oraz temperatury, przy czym oba te czynniki zmieniają go w podobny sposób (Rys. 7).**[H4,H7]** Jest to zgodne z wynikami eksperymentalnymi, sugerującymi kluczową rolę zarówno temperatury, jak i stopnia uwodnienia w KPE. W pracy **[H5]** pokazałem natomiast, jak zmienia się średnie przesunięcie kwadratowe grup funkcyjnych PE w funkcji stopnia uwodnienia KPE i temperatury. Analogicznie jak w przypadku molekuł wody, lokalna mobilność łańcuchów PE zmienia się

zarówno pod wpływem temperatury jak i stopnia uwodnienia. Temperatura zwiększa ruchy cieplne natomiast dodatkowa ilość wody w układzie zwiększa jego objętość swobodną. Jak pokazały obszerne badania eksperymentalne kompleksów PAH-PAA, z wykorzystaniem dynamicznej analizy mechanicznej,**[H5]** do opisu zmian we właściwościach mechanicznych KPE związanych ze zmianą temperatury oraz stopnia uwodnienia można zastosować zasadę superpozycji. Wykonane przeze mnie modelowanie analogicznych układów pokazało, że wpływ na mobilność PE można uzyskać zmieniając odpowiednio temperaturę, stopień uwodnienia, bądź oba te parametry jednocześnie. Wskazuje to na addytywność tych parametrów oraz tłumaczy stosowalność zasady superpozycji. Dodatkowo, wyznaczyłem ilość wewnętrznie skompensowanych par jonowych w tych układach w funkcji temperatury oraz stopnia uwodnienia. Otrzymane wyniki wskazują, że wraz z temperaturą, ilość par jonowych skompensowanych wewnętrznie jest praktycznie niezmienna, natomiast zwiększenie stopnia uwodnienia zmniejsza ilość par jonowych skompensowanych wewnętrznie. To z kolei sugeruje, że zakres stosowalności zasady superpozycji w przypadku stopnia uwodnienia może być ograniczony i zależeć od rodzaju użytych PE oraz ich oddziaływań z molekułami wody.**[H7]**



Rysunek 8. Średnia ilość wiązań wodorowych przypadająca na grupę funkcyjną PSS w parze jonowej skompensowanej (a) wewnętrznie oraz (b) zewnętrznie w kompleksie PDADMA-PSS, w funkcji temperatury oraz stopnia uwodnienia.**[H3]**

Innym osiągnięciem, było wyjaśnienie mechanizmu przejścia szklistego w uwodnionych kompleksach polielektrolitów.**[H3]** Wykonałem obszerne modelowanie kompleksów PDADMA-PSS, których skład odpowiadał składowi wyznaczonemu z analizy aktywacyjnej neutronów KPE otrzymanych eksperymentalnie. Badania teoretyczne pozwoliły wyznaczyć ilość par jonowych skompensowanych zewnętrznie i wewnętrznie (Rys. 2). Obszerna analiza teoretyczna pokazała, że wraz ze wzrostem temperatury wokół par jonowych skompensowanych wewnętrznie można zaobserwować wyraźny spadek ilości wiązań wodorowych między cząsteczkami wody a PE (Rys. 8). Te wyniki zostały użyte do interpretacji danych eksperymentalnych, tj. przedstawienia temperatury zeszklenia w funkcji stężenia elektrolitu oraz stopnia uwodnienia. Zmierzone temperatury zeszklenia opisano zależnością liniową w funkcji liczby molekuł wody przypadającej na parę jonową skompensowaną wewnętrznie. Zastosowana normalizacja przez ilość par jonowych skompensowanych wewnętrznie okazała się również skuteczna dla kompleksu PAH-PAA formowanego w różnych pH. Fakty te sugerują, że mechanizm przemiany szklistej związany jest z molekułami wody i ich wiązaniami wodorowymi tworzonymi z PE. Rozpad tych wiązań osłabia energię wiązania

par jonowych skompensowanych wewnętrznie, co wpływa znacząco na właściwości reologiczne KPE. Ponadto, cząsteczki wody otaczające cząsteczki PE zwiększają ruchliwość i relaksację łańcuchów PE w kompleksie. Wyniki te można potencjalnie uogólnić na dowolny układ makrocząsteczkowy, zarówno naturalny jak i syntetyczny.

Warto podkreślić fakt że nasza publikacja w renomowanym czasopiśmie ACS Central Science **[H3]** została skomentowana przez eksperta w dziedzinie, Matthew Tirrella, jako wnosząca znaczący postęp w zrozumieniu stanu fizycznego materiałów powstałych w wyniku kompleksowania polielektrolitów.[22]

Podsumowując, mój wkład w zrozumienie na poziomie molekularnym mechanizmów tworzenia kompleksów polielektrolitów jest następujący:

- systematyczne badania nad mechanizmem zjawiska kondensacji jonowej i wpływem rodzaju grupy funkcyjnej PE, przeciwjonu oraz pH na to zjawisko, określenie zakresu stosowalności zmodyfikowanego równania PB do opisu tego zjawiska, a także wykazanie, że grubość warstwy jonów skondensowanych jest parametrem uniwersalnym, niezależnym od rodzaju grupy funkcyjnej PE oraz rodzaju przeciwjonu, pozwalającym powiązać kondensację jonową z liniową gęstością ładunku PE,**[H1]**
- wyznaczanie średnicy, długości, efektywnego ładunku, konformacji oraz gęstości wybranych PE w roztworach wodnych,**[H2,H6]** oraz pokazanie, że średnia długość łańcucha PE jest liniowo zależna od ilości monomerów w warunkach niskiej siły jonowej,
- określenie wpływu stopnia jonizacji na konformację oraz udziały α-helisy i struktury β wybranych polipeptydów, a także wyznaczenie zakresu stosowalności powszechnie używanych pól siłowych, stanowiącego istotną informację dla dalszych badań teoretycznych w tej tematyce,**[H8]**
- analiza dynamiki molekuł wody w KPE dla różnych PE,**[H4,H7]** pokazująca, że większość cząsteczek wody w KPE jest unieruchomiona,**[H4]** oraz że trwałość par jonowych skompensowanych wewnętrznie jest związana z ich zdolnością do tworzenia wiązań wodorowych z cząsteczkami wody,**[H7]**
- wskazanie na znaczący wpływ temperatury oraz stopnia uwodnienia KPE na wartości średniego współczynnika dyfuzji molekuł wody **[H4]** oraz średniego przesunięcia kwadratowego grup funkcyjnych PE,**[H5]** jak również na addytywność efektów wywieranych przez temperaturę oraz stopień uwodnienia m.in. na właściwości reologiczne KPE, co wyjaśnia stosowalność zasady superpozycji do opisu wyników eksperymentalnych,
- wyjaśnienie zjawiska przejścia szklistego w uwodnionych KPE jako efektu rozrywania wiązań wodorowych między molekułami wody i grupami funkcyjnymi PE w parach jonowych skompensowanych wewnętrznie.**[H3]**

Literatura

[1] M.A.C. Stuart, W.T.S. Huck, J. Genzer, M. Müller, C. Ober, M. Stamm, G.B. Sukhorukov, I. Szleifer, V. V. Tsukruk, M. Urban, F. Winnik, S. Zauscher, I. Luzinov, S. Minko, Emerging applications of stimuli-responsive polymer materials, Nat. Mater. 9 (2010) 101–113. https://doi.org/10.1038/nmat2614.

[2] Y. Zhang, E. Yildirim, H.S. Antila, L.D. Valenzuela, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, The influence of ionic strength and mixing ratio on the colloidal stability of PDAC/PSS polyelectrolyte complexes, Soft Matter. 11 (2015) 7392–7401. https://doi.org/10.1039/C5SM01184A.

[3] Z. Sui, J.A. Jaber, J.B. Schlenoff, Polyelectrolyte Complexes with pH-Tunable Solubility, Macromolecules. 39 (2006) 8145–8152. https://doi.org/10.1021/MA061098Q.

[4] J.B. Schlenoff, A.H. Rmaile, C.B. Bucur, Hydration contributions to association in polyelectrolyte multilayers and complexes: Visualizing hydrophobicity, J. Am. Chem. Soc. 130 (2008) 13589–13597. https://doi.org/10.1021/ja802054k.

[5] Z. Wang, N. Cai, Q. Dai, C. Li, D. Hou, X. Luo, Y. Xue, F. Yu, Effect of thermal annealing on mechanical properties of polyelectrolyte complex nanofiber membranes, Fibers Polym. 15 (2014) 1406–1413. https://doi.org/10.1007/s12221-014-1406-2.

[6] D.K. Reid, A. Summers, J. O'Neal, A. V. Kavarthapu, J.L. Lutkenhaus, Swelling and Thermal Transitions of Polyelectrolyte Multilayers in the Presence of Divalent Ions, Macromolecules. 49 (2016) 5921–5930. https://doi.org/10.1021/acs.macromol.6b01164.

[7] C.C. Shiu, S. Wang, C.H. Chang, J.S. Jan, Poly(l -glutamic acid)-decorated hybrid colloidal particles from complex particle-templated silica mineralization, J. Phys. Chem. B. 117 (2013) 10007–10016. https://doi.org/10.1021/jp403753z.

[8] J.T. O'Neal, E.Y. Dai, Y. Zhang, K.B. Clark, K.G. Wilcox, I.M. George, N.E. Ramasamy, D. Enriquez, P. Batys, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, QCM-D Investigation of Swelling Behavior of Layer-by-Layer Thin Films upon Exposure to Monovalent Ions, Langmuir. 34 (2018). https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b02836.

[9] A.W. Imre, M. Schönhoff, C. Cramer, Unconventional scaling of electrical conductivity spectra for PSS-PDADMAC polyelectrolyte complexes, Phys. Rev. Lett. 102 (2009). https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.255901.

[10] S. De, C. Cramer, M. Schönhoff, Humidity dependence of the ionic conductivity of polyelectrolyte complexes, Macromolecules. 44 (2011) 8936–8943. https://doi.org/10.1021/ma201949s.

[11] R.F. Shamoun, H.H. Hariri, R.A. Ghostine, J.B. Schlenoff, Thermal transformations in extruded saloplastic polyelectrolyte complexes, Macromolecules. 45 (2012) 9759–9767. https://doi.org/10.1021/ma302075p.

[12] A. Vidyasagar, C. Sung, R. Gamble, J.L. Lutkenhaus, Thermal transitions in dry and hydrated layer-by-layer assemblies exhibiting linear and exponential growth, ACS Nano. 6 (2012) 6174–6184. https://doi.org/10.1021/nn301526b.

[13] R. Zhang, Y. Zhang, H.S. Antila, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, Role of Salt and Water in the Plasticization of PDAC/PSS Polyelectrolyte Assemblies, J. Phys. Chem. B. 121 (2017) 322–333. https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.6b12315.

[14] E. Yildirim, Y. Zhang, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, Thermal Transitions in Polyelectrolyte Assemblies Occur via a Dehydration Mechanism, ACS Macro Lett. 4 (2015) 1017–1021. https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.5b00351.

[15] A. Vidyasagar, C. Sung, K. Losensky, J.L. Lutkenhaus, PH-dependent thermal transitions in hydrated layer-by-layer assemblies containing weak polyelectrolytes, Macromolecules. 45 (2012) 9169–9176. https://doi.org/10.1021/ma3020454.

[16] Y. Zhang, P. Batys, J.T. O'Neal, F. Li, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, Molecular Origin of the Glass Transition in Polyelectrolyte Assemblies, ACS Cent. Sci. 4 (2018) 638–644. https://doi.org/10.1021/acscentsci.8b00137.

[17] Y. Zhang, F. Li, L.D. Valenzuela, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, Effect of water on the thermal transition observed in poly(allylamine hydrochloride)-poly(acrylic acid) complexes, Macromolecules. 49 (2016) 7563–7570. https://doi.org/10.1021/acs.macromol.6b00742.

[18] G. Decher, Fuzzy Nanoassemblies: Toward Layered Polymeric Multicomposites, Science 277 (1997) 1232–1237. https://doi.org/10.1126/science.277.5330.1232.

[19] S. Grohmann, H. Rothe, K. Liefeith, Investigations on the secondary structure of polypeptide chains in polyelectrolyte multilayers and their effect on the adhesion and spreading of osteoblasts, Biointerphases. 7 (2012) 1–13. https://doi.org/10.1007/s13758-012-0062-6.

[20] O. Guvench, A.D. MacKerell, Comparison of protein force fields for molecular dynamics simulations, Methods Mol. Biol. 443 (2008) 63–88. https://doi.org/10.1007/978-1-59745-177-2_4.

[21] S.A. Shaheen, M. Yang, B. Chen, J.B. Schlenoff, Water and Ion Transport through the Glass Transition in Polyelectrolyte Complexes, Chem. Mater. 32 (2020) 5994–6002. https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.0c01217.

[22] M. Tirrell, Polyelectrolyte Complexes: Fluid or Solid?, ACS Cent. Sci. 4 (2018) 532–533. https://doi.org/10.1021/acscentsci.8b00284.

5. Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową albo artystyczną realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury, w szczególności zagranicznej.

Moja aktywność naukowa realizowana poza jednostką macierzystą, w szczególności zagraniczna, to przede wszystkim owocny (6 publikacji) staż podoktorski na Aalto University, Finlandia **(03.2016 – 08.2018)** ale także szereg staży zagranicznych w renomowanych ośrodkach naukowych:

01.2019 – Aalto University, Finlandia (2 tygodnie)
03.2019 – Technical University of Munich, Niemcy (1 tydzień)
04-05.2019 – Texas A&M University, USA (1 miesiąc)
11.2019 – Vrije Universiteit Brussel, Belgia (1 tydzień)

Wymiernym wskaźnikiem mojej aktywności międzynarodowej jest fakt, że z **16** publikacji naukowych po doktoracie, aż **12** jest we współpracy międzynarodowej, z czego **7** zostało opublikowanych po stażu po doktorskim. Ponadto, obecnie realizuje projekt naukowy (Sonata, NCN) we współpracy z jednostkami z Finlandii i USA, co podkreśla funkcjonalną i dobrze prosperującą współpracę międzynarodową.

Warto również wspomnieć, że już podczas doktoratu wykazywałem się aktywnością międzynarodową. Poza licznymi konferencjami zagranicznymi (szczegółowa lista w załączniku nr. 4) odbyłem także dwa profesjonalne szkolenia z modelowania teoretycznego:

21-30.07.2014 - „CCP5 Summer School 2014 – Methods in Molecular Simulation", University of Manchester, Wielka Brytania,

23-28.08.2015 - „2015 Martini Coarse-Graining Workshop", University of Groningen, Holandia.

6. Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę.

Moje działania na rzecz popularyzacji nauki to przede wszystkim czynny udział w Festiwalach Nauki w Krakowie podczas studiów doktoranckich w latach 2011-2014, a także w Dniach Otwartych Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN w latach 2011-2015 oraz 2019.

Ponadto, wygłosiłem dwa 1-godzinne wykłady szkoleniowe pt. „Application of the Molecular Dynamics method for studying polyelectrolytes and proteins" na seminariach wydziałowych, podczas pobytów na Texas A&M University oraz Vrije Universiteit Brussel.

Moje doświadczenie dydaktyczne to głównie instruowanie oraz opieka nad doktorantami, magistrantami oraz stażystami podczas pobytu na stażu podoktorskim na Uniwersytecie Aalto:

Dmitri Fedorov (doktorant) "Molecular Dynamics and Analytical Ultracentrifuge studies of protein-protein interactions", Aalto University Department of Bioproducts and Biosystems (rezultaty opublikowane w artykule: D. Fedorov, et al. Int. J. Biol. Macromolecules 163 (2020) 1995-2004)

Laura Lemetti (doktorantka) "Isothermal titration calorimetry (ITC) measurements of silk-like protein coacervation", Aalto University Department of Bioproducts and Biosystems (rezultaty opublikowane w artykule: L. Lemetti, et al. Eur. Polym. J, 112 (2019) 539-546)

Tero Kämäräinen (doktorant) "Modelling of colloidal particles self-assembly", Aalto University Department of Bioproducts and Biosystems
(rezultaty opublikowane w artykule: T. Kämäräinen et al. J. Colloid Interface Sci., 579 (2020) 794-804)

Zahra Mohammadi (doktorantka) "Molecular dynamics modelling of polyelectrolyte complexes" Aalto University Department of Chemistry and Materials Science

Maisa Vuorte (magistrantka) "Monte Carlo modelling of ion condensation around polyelectrolyte", Aalto University Department of Chemistry and Materials Science

Sohvi Luukkonen (magistrantka) "Molecular Dynamics modelling of ion condensation around polyelectrolytes", Aalto University Department of Chemistry and Materials Science.
(rezultaty opublikowane w artykule: P. Batys et al. Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 24583-24593 (2017))

Samu Kivistö (magistrant) "Modelling of stratification of colloidal particles", Aalto University Department of Chemistry and Materials Science (rezultaty opublikowane w artykule: O. Cusola et al. Langmuir 34, 5759-5771 (2018))

Anna Leino (magistrantka) "Molecular dynamics modelling of ion condensation around polyelectrolytes in urea-water and ethanol-water mixtures" Aalto University Department of Chemistry and Materials Science (publikacja opisująca rezultaty w przygotowaniu)

Iina Kivimäki (magistrantka) "Molecular dynamics modelling of salt concentration effect on ion condensation around polyelectrolytes in ethanol-water mixture" Aalto University Department of Chemistry and Materials Science

7. Inne informacje dotyczące kariery zawodowej.

Krótki opis dalszych planów naukowych oraz osiągnięć naukowych po doktoracie, nieujętych w cyklu habilitacyjnym:

Poza powyżej wymienionymi osiągnięciami wchodzącymi do cyklu habilitacyjnego, brałem również aktywny udział w planowaniu eksperymentów i interpretacji wyników eksperymentalnych, czego efektem jest współautorstwo w dwóch publikacjach w tematyce osiągnięcia habilitacyjnego, przedstawiających jedynie wyniki eksperymentalne:

- J.T. O'Neal, E.Y. Dai, Y. Zhang, K.B. Clark, K.G. Wilcox, I.M. George, N.E. Ramasamy, D. Enriquez, **P. Batys**, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, "QCM-D Investigation of Swelling Behavior of Layerby-Layer Thin Films upon Exposure to Monovalent Ions", Langmuir, 34 (2018) 999-1009
- C.I. Eneh, M.J. Bolen, P.C. Suarez-Martinez, A.L. Bachmann, T.J. Zimudzi, M.A. Hickner, **P. Batys**, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, "Fourier transform infrared spectroscopy investigation of water microenvironments in polyelectrolyte multilayers at varying temperatures", Soft Matter, 16 (2020) 2291-2300.

Poza tematyką związaną z cyklem habilitacyjnym interesuję się również fizykochemią układów koloidalnych. W ramach kontynuacji tematyki pracy doktorskiej, opublikowałem dwa artykuły naukowe:

- **P. Batys**, P. Weroński, M. Nosek, "Wet Formation and Structural Characterization of Quasi - Hexagonal Monolayers", J. Colloid Interface Sci., 461 (2016) 211-214, oraz
- **P. Batys**, P. Weroński, M. Nosek, M. Skoczek, "Effective Diffusivity of Colloidal Particle Multilayers", Colloids Surf., A, 510 (2016) 176-182.

W obu tych publikacjach pełniłem funkcję autora korespondencyjnego a mój udział w powstanie tych prac był dominujący.

Również w tematyce koloidów, w ramach współpracy z grupą Prof. Orlando Rojasa, wykorzystałem swoje doświadczenie w modelowaniu układów koloidalnych nabyte podczas doktoratu, do interpretacji wyników eksperymentalnych. Efektem, tej wciąż aktywnej współpracy, są dwa artykuły naukowe:

- O. Cusola, S. Kivistö, S. Vierros, **P. Batys**, M. Ago, B. Tardy, L. Greca, M.B. Blanca, M. Sammalkorpi, O. Rojas, "Particulate Coatings Via Evaporation - Induced Self - Assembly of Polydisperse Colloidal Lignin on Solid Interfaces", Langmuir, 34 (2018) 5759-5771
- T. Kämäräinen, B. L. Tardy, S. J. Nikkhah, **P. Batys**, M. Sammalkorpi, O. J. Rojas, "Effect of particle surface corrugation on colloidal interactions", J. Colloid Interface Sci., 579 (2020) 794-804.

Kolejną tematyką, z którą wiąże swoje plany są badania nad separacją faz białek oraz określenie kluczowych oddziaływań kontrolujących ten proces. Zjawisko to jest istotne w badaniach nad procesami zachodzącymi w komórkach, może być również wykorzystane do wytwarzania biomateriałów o kontrolowanych właściwościach. Tę tematykę realizuję we

współpracy z grupą Prof. Markusa Lindera (Aalto University) oraz Prof. Petera Tompy (Vrije Universiteit Brussel). Dotychczasowym efektem tej współpracy są dwie publikacje naukowe, w których wykonywałem obliczenia teoretyczne oraz brałem udział w interpretacji wyników eksperymentalnych:

- L. Lemetti, S-P. Hirvonen, D. Fedorov, **P. Batys**, M. Sammalkorpi, H. Tenhu, M.B. Linder, A.S. Aranko, "Molecular crowding facilitates assembly of spidroin-like proteins through phase separation", European Polymer Journal, 112 (2019) 539-546,
- D. Fedorov, **P. Batys**, D. B. Hayes, M. Sammalkorpi, M. B. Linder, Analyzing the weak dimerization of a cellulose binding module by analytical ultracentrifugation, Int. J. Biol. Macromolecules 163 (2020) 1995-2004,

a także poster na konferencji 44th FEBS Congress, 6-11.07.2019 w Krakowie:

- A. Bratek-Skicki, J. Van Lindt, **P. Batys**, D. Maes, P. Tompa, "A generic approach for studying the kinetics of liquid-liquid phase separation of ALS-linked proteins"

Kolejne publikacje w tej tematyce są w przygotowaniu. Ponadto, we współpracy z Dr Marią Sammalkorpi oraz Prof. Markusem Linderem (Aalto University) a także Prof. Mikko P. Haataja (Princeton University) aplikowaliśmy o grant (Academy of Finland) w tej tematyce.

Jak wspomniałem powyżej, moje przyszłe plany naukowe związane są z modelowaniem układów biologicznych, ale także z kontynuacją i rozwijaniem tematyki przedstawionej w habilitacji. W ramach projektu Sonata, NCN (2019-2022), realizowanego we współpracy z Prof. Jodie Lutkenhaus (Texas A&M University) oraz Dr Marią Sammalkorpi i Markusem Linderem (Aalto University), związanego z kompleksami polipeptydów, zaplanowałem obszerne badania teoretyczne i eksperymentalne tych układów. Ponadto, w ramach tej współpracy planujemy m.in. określenie wpływu perkolacji fazy wodnej w KPE na ich właściwości.

Planuję również we współpracy z zagranicznymi ośrodkami badawczymi syntezę polielektrolitów funkcjonalizowanych cyklodekstrynami oraz wykorzystanie ich do formowania KPE. Ze względu na specyficzną strukturę cyklodekstryn, pozwoli to otrzymać KPE będące nośnikami hydrofobowych substancji aktywnych, np. substancji czynnych leków. Grant Rozwojowy (wewnętrzny grant IKiFP) w tej tematyce jest obecnie w recenzji.

Ponadto, zabiegam o pozyskanie doktorantów oraz magistrantów, co pozwoliłoby mi na stworzenie grupy specjalizującej się w realizowanych przeze mnie badaniach teoretycznych, ale także eksperymentalnych. W najbliższym czasie planuję aplikować o grant Preludium Bis (NCN), w celu pozyskania funduszy na doktoranta.

Otrzymane nagrody i wyróżnienia:

05.2018 - Nagroda za najlepszy poster na konferencji „Computational Chemistry Days" 2018 w Helsinkach

2014, 2015, 2018 - Nagroda za najlepszą oryginalną publikację Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk

2013 – 2015 - Stypendium naukowe dla najlepszych doktorantów (Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica)

2013 – 2015 - Stypendium projakościowe (Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica)

2010 – 2014 - Stypendium naukowe (Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica)

2008 – 2010 - Stypendium naukowe (Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Politechnika Krakowska im.Tadeusza Kościuszki)

[redacted].....
(podpis wnioskodawcy)

Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny
Informacje zawarte w poszczególnych punktach tego dokumentu powinny uwzględniać podział na okres przed uzyskaniem stopnia doktora oraz pomiędzy uzyskaniem stopnia doktora a uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego.

I. INFORMACJA O OSIĄGNIĘCIACH NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY

1. **Monografia naukowa, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2a Ustawy; lub**
2. **Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b Ustawy; lub**
3. **Wykaz zrealizowanych oryginalnych osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych lub artystycznych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2c Ustawy.**

W przypadku prac dwu- lub wieloautorskich zaleca się złożenie oświadczenia przez habilitanta oraz współautorów wskazujące na ich merytoryczny (a NIE procentowy) wkład w powstanie każdej pracy [np. twórca hipotezy badawczej, pomysłodawca badań, wykonanie specyficznych badań (np. przeprowadzenie konkretnych doświadczeń, opracowanie i zebranie ankiet, itp.), wykonanie analizy wyników, przygotowanie manuskryptu artykułu, i inne]. Określenie wkładu danego autora, w tym habilitanta, powinno być na tyle precyzyjne, aby umożliwić dokładną ocenę jego udziału i roli w powstaniu każdej pracy.

Cykl publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe (✉ - autor korespondencyjny)**:**

H1. **P. Batys**✉, S. Luukkonen, M. Sammalkorpi, "Ability of the Poisson–Boltzmann Equation to Capture Molecular Dynamics Predicted Ion Distribution Around Polyelectrolytes", Phys. Chem. Chem. Phys, 19 (2017) 24583-24593
(IF = **3,906**, 5-letni IF: 4,224, punkty MNiSW: **100**), liczba cytowań **14** (bez autocytowań 8)

Mój udział w powstanie tej pracy polegał na współudziale w koncepcji pracy, zaplanowaniu symulacji metodą dynami molekularnej (MD), przygotowanie plików wejściowych dla magistrantki (Sohvi Luukkonen), analizie i interpretacji danych otrzymanych z symulacji komputerowych. W oparciu o raport stażystki napisałem manuskrypt a także przygotowałem wszystkie rysunki, wykresy i tabele. Ponadto, pełniłem rolę autora korespondencyjnego a także odpowiedziałem na pytania recenzentów i przygotowałem końcową wersję publikacji.

H2. Z. Adamczyk, M. Morga✉, D. Kosior, **P. Batys**, "Conformations of Poly-L-lysine Molecules in Electrolyte Solutions: Modeling and Experimental Measurements", J. Phys. Chem. C, 122 (2018) 23180-23190
(IF = **4,309**, 5-letni IF: 4,537, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **7** (bez autocytowań 5)

Mój wkład w powstanie tej publikacji obejmował całokształt pracy związanej z modelowaniem metodą MD, w tym zaplanowanie i przeprowadzenie symulacji, analiza i interpretacja otrzymanych danych, a także opis części poświęconej metodzie MD oraz wyników i dyskusji związanej z otrzymanymi wynikami. Przygotowałem również wykresy nr. 1, 2, 3, 4, tabele nr. 1 i 2, oraz abstrakt graficzny.

H3. Y. Zhang, **P. Batys**, J.T. O'Neal, F. Li, M Sammalkorpi✉, J.L. Lutkenhaus✉, "The Molecular Origin of the Glass Transition in Polyelectrolyte Assemblies", ACS Cent. Sci,

4 (2018) 638-644
(IF = **12,837**, 5-letni IF: 13,180, punkty MNiSW: **200**), liczba cytowań **38** (bez autocytowań 33)

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował współudział w stworzeniu koncepcji pracy, zaplanowanie i przeprowadzenie modelowania metodą MD a także interpretację otrzymanych wyników. Napisałem części manuskryptu związane z wynikami otrzymanymi przeze mnie a także przygotowałem wykresy nr. 4, 5, S1, S2, S8, S9, S10 oraz tabele S1 i S2. Opracowałem również odpowiedzi na pytania recenzentów dotyczące metody MD i otrzymanych przeze mnie wyników.

H4. **P. Batys**, Y. Zhang, J.L. Lutkenhaus✉, M Sammalkorpi✉, "Hydration and Temperature Response of Water Mobility in Poly(diallyldimethylammonium)–Poly(sodium 4-styrenesulfonate) Complexes", Macromolecules , 51 (2018) 8268–8277
(IF = **5,997**, 5-letni IF: 5,629, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **8** (bez autocytowań 4)

Mój wkład w powstanie tej pracy obejmował stworzenie koncepcji pracy, zaplanowanie i przeprowadzenie modelowania metodą MD a także analiza i interpretacja otrzymanych wyników. Ponadto, miałem współudział w zaplanowaniu badań eksperymentalnych, mających na celu weryfikacje wyników teoretycznych. Napisałem manuskrypt a także przygotowałem wszystkie rysunki i tabele z wyłączeniem Rys. 2a, przedstawiającego wyniki eksperymentalne.

H5. P.C. Suarez-Martinez, **P. Batys**, M. Sammalkorpi✉, J.L. Lutkenhaus✉, "Time-Temperature and Time-Water Superposition Principles Applied to Poly(allylamine)/Poly(acrylic acid) Complexes", Macromolecules, 52 (8) (2019) 3066-3074
(IF = **5,918**, 5-letni IF: 5,654, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **11** (bez autocytowań 9)

Mój wkład w powstanie pracy obejmuje zaplanowanie i przeprowadzenie symulacji metodą dynamiki molekularnej oraz analiza i interpretacja otrzymanych danych a także opis części poświęconej metodzie MD oraz wniosków i dyskusji związanej z wynikami otrzymanymi tą metodą. Przygotowałem także wykresy nr. 6, S2, S10, S11 oraz tabelę S5.

H6. A. Michna✉, **P. Batys**, M. Morga, A. Pomorska, M. Wytrwal-Sarna, M. Kepczynski, Z. Adamczyk, "Formation of Strong Polycation (Poly[(3-allylamino-2- hydroxypropyl) trimethylammonium chloride]) Monolayers on Mica, Silica, and Gold Substrates: Modeling and Experimental Studies", J. Phys. Chem. C, 123 (2019) 19022-19032
(IF = **4,189**, 5-letni IF: 4,404, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **2** (bez autocytowań 1)

Mój wkład w powstanie tej publikacji obejmował całokształt pracy związanej z modelowaniem metodą MD, w tym zaplanowanie i przeprowadzenie symulacji, analiza i interpretacja otrzymanych danych, a także opis części poświęconej metodzie dynamiki molekularnej oraz wyników i dyskusji związanej z otrzymanymi wynikami. Przygotowałem również wykresy nr. 1, 2, S1, S2, oraz S3.

H7. **P. Batys**✉, S. Kivisto, S.M. Lalwani, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, "Comparing Water-Mediated Hydrogen-Bonding in Different Polyelectrolyte Complexes", Soft Matter, 15 (2019) 7823 – 7831
(IF = **3,140**, 5-letni IF: 3,466, punkty MNiSW: **100**), liczba cytowań **4** (bez autocytowań 2)

Moje zaangażowanie w powstanie tej publikacji obejmowało, współudział w stworzeniu koncepcji pracy, zaplanowanie i przygotowanie plików startowych do symulacji metodą MD

dla stażysty (Samu Kivisto), pomoc w analizie i interpretacji danych z symulacji komputerowych, a także przygotowanie wszystkich rysunków, wykresów i tabel dotyczących wyników modelowania MD oraz abstraktu graficznego, napisanie i wysłanie manuskryptu (rola autora korespondencyjnego) oraz odpowiedzi na recenzje.

H8. **P. Batys**✉, M. Morga, P. Bonarek, M. Sammalkorpi, "pH-Induced Changes in Polypeptide Conformation: Force-Field Comparison with Experimental Validation", J. Phys. Chem. B, 124 (2020) 2961-2972
(IF = **2,857**, 5-letni IF: 2,880, punkty MNiSW: **140**), liczba cytowań **0**

Mój udział w powstaniu tej publikacji obejmował stworzenie koncepcji pracy oraz całokształt pracy związanej z modelowaniem metodą MD, w tym zaplanowanie i przeprowadzenie symulacji, analiza i interpretacja otrzymanych danych, a także napisanie i wysłanie manuskryptu (rola autora korespondencyjnego) oraz odpowiedzi na recenzje. Brałem również udział w planowaniu badań eksperymentalnych oraz przeprowadziłem analizę wyników otrzymanych z dichroizmu kołowego. Przygotowałem również wykresy nr. 1, 3, 4, S1, S3, S4, S5 oraz tabele 1, 3, 4, S5 a także abstrakt graficzny.

Oryginalne publikacje (wraz z Supplementary Information) oraz oświadczenia wszystkich współautorów określające indywidualny wkład każdego z nich w powstanie każdej z prac cyklu zebrano w załącznikach 5 oraz 6.

Sumaryczny IF cyklu prac zgodnie z rokiem ich opublikowania wynosi **41,153**. Suma punktów według ujednoliconego wykazu czasopism punktowanych MNiSW wynosi **1100**. Liczba cytowań cyklu publikacji, według bazy Scopus, wynosi **84** (bez autocytowań **62**) (*dane z 25 października 2020 roku*).

II. INFORMACJA O AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ

1. Wykaz opublikowanych monografii naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.1).

brak

2. Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych.

brak

3. Informacja o członkostwie w redakcjach naukowych monografii.

brak

4. Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.2).

4.1. Artykuły opublikowane po uzyskaniu stopnia doktora (niewchodzące w skład osiągnięcia naukowego)

1) D. Fedorov, **P. Batys**, D. B. Hayes, M. Sammalkorpi, M. B. Linder✉, Analyzing the weak dimerization of a cellulose binding module by analytical ultracentrifugation, Int. J. Biol. Macromolecules 163 (2020) 1995-2004
(IF = 5,137, 5-letni IF: 5,162, punkty MNiSW: 100), liczba cytowań 0

2) C.I. Eneh, M.J. Bolen, P.C. Suarez-Martinez, A.L. Bachmann, T.J. Zimudzi, M.A. Hickner, **P. Batys**, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus✉, "Fourier transform infrared spectroscopy investigation of water microenvironments in polyelectrolyte multilayers at varying temperatures", Soft Matter, 16 (2020) 2291-2300
(IF = 3,140, 5-letni IF: 3,466, punkty MNiSW: 100), liczba cytowań 0

3) T. Kämäräinen✉, B. L. Tardy, S. J. Nikkhah, **P. Batys**, M. Sammalkorpi✉, O. J. Rojas✉, "Effect of particle surface corrugation on colloidal interactions", J. Colloid Interface Sci., 579 (2020) 794-804
(IF = 7,489, 5-letni IF: 6,171, punkty MNiSW: 100), liczba cytowań 0

4) L. Lemetti, S-P. Hirvonen, D. Fedorov, **P. Batys**, M. Sammalkorpi, H. Tenhu, M.B. Linder✉, A.S. Aranko✉, "Molecular crowding facilitates assembly of spidroin-like proteins through phase separation", European Polymer Journal, 112 (2019) 539-546
(IF = 3,862, 5-letni IF: 4,166, punkty MNiSW: 100), liczba cytowań 6 (bez autocytowań 5)

5) O. Cusola✉, S. Kivistö, S. Vierros, **P. Batys**, M. Ago, B. Tardy, L. Greca, M.B. Blanca, M. Sammalkorpi, O. Rojas✉, "Particulate Coatings Via Evaporation - Induced Self - Assembly of Polydisperse Colloidal Lignin on Solid Interfaces", Langmuir, 34 (2018) 5759-5771
(IF = 3,683, 5-letni IF: 3,888, punkty MNiSW: 100), liczba cytowań 13 (bez autocytowań 13)

6) J.T. O'Neal, E.Y. Dai, Y. Zhang, K.B. Clark, K.G. Wilcox, I.M. George, N.E. Ramasamy, D. Enriquez, **P. Batys**, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus✉, "QCM-D Investigation of Swelling Behavior of Layerby-Layer Thin Films upon Exposure to Monovalent Ions", Langmuir, 34 (2018) 999-1009
(IF = 3,683, 5-letni IF: 3,888, punkty MNiSW: 100), liczba cytowań 26 (bez autocytowań 23)

7) **P. Batys**✉, P. Weroński, M. Nosek, "Wet Formation and Structural Characterization of Quasi - Hexagonal Monolayers", J. Colloid Interface Sci., 461 (2016) 211-214
(IF = 4,233, 5-letni IF: 3,988, punkty MNiSW: 30), liczba cytowań 2 (bez autocytowań 1)

8) **P. Batys**✉, P. Weroński, M. Nosek, M. Skoczek, "Effective Diffusivity of Colloidal Particle Multilayers", Colloids Surf., A, 510 (2016) 176-182
(IF = 2,714, 5-letni IF: 2,838, punkty MNiSW: 30), liczba cytowań 1 (bez autocytowań 1)

4.2.Artykuły opublikowane przed uzyskaniem stopnia doktora

1) **P. Batys**✉, M. Nosek, P. Weroński, "Structure Analysis of Layer-by-Layer Multilayer Films of Colloidal Particles", Appl. Surf. Sci., 332 (2015) 318-327
(IF = 3,150, 5-letni IF: 2,982, punkty MNiSW: 35), liczba cytowań 4 (bez autocytowań 1)

2) **P. Batys**✉, M. Nosek, M. Skoczek, P. Weroński, "Synthesis and Quantitative Characterization of Non - Conductive Colloidal Particle Multilayers", Electrochim. Acta, 164 (2015) 71-80
(IF = 4,803, 5-letni IF: 4,721, punkty MNiSW: 40), liczba cytowań 2 (bez autocytowań 1)

3) A.Michna, Z. Adamczyk✉, **P. Batys**, "Mapping Single Macromolecule Chains Using the Colloid Deposition Method: PDADMAC on Mica", J. Colloid Interface Sci., 450

(2015) 82-90
(IF = 3,782, 5-letni IF: 3,758, punkty MNiSW: 30), liczba cytowań 9 (bez autocytowań 8)

4) M. Nosek✉, **P. Batys**, M. Skoczek, P. Weroński, "Cyclic Voltammetry Characterization of Microparticle Monolayers", Electrochim. Acta, 133 (2014) 241-246
(IF = 4,504, 5-letni IF: 4,578, punkty MNiSW: 40), liczba cytowań 9 (bez autocytowań 4)

5) **P. Batys**✉, P. Weroński, "Porosity and Tortuosity of Layer-by-Layer Assemblies of Spherical Particles", Model. Simul. Mater. Sci., 22 (2014) 065017
(IF = 2,167, 5-letni IF: 2,696, punkty MNiSW: 30), liczba cytowań 5 (bez autocytowań 2)

6) Z. Adamczyk✉, K. Jamroży, **P. Batys**, A. Michna, "Influence of Ionic Strength on Poly(diallyldimethylammonium chloride) Macromolecule Conformations in Electrolyte Solutions", J. Colloid Interface Sci., 435 (2014) 182-190
(IF = 3,368, 5-letni IF: 3,637, punkty MNiSW: 30), liczba cytowań 23 (bez autocytowań 18)

7) P. Weroński✉, M. Nosek, **P. Batys**, "Limiting diffusion current at rotating disk electrode with dense particle layer", J. Chem. Phys., 139 (2013) 124705
(IF = 3,122, 5-letni IF: 3,142, punkty MNiSW: 35), liczba cytowań 8 (bez autocytowań 2)

8) **P. Batys**✉, P. Weroński, "Modeling of LbL Multilayers with Controlled Thickness, Roughness and Specific Surface Area", J. Chem. Phys, 137 (2012) 214706
(IF = 3,164, 5-letni IF: 3,176, punkty MNiSW: 35), liczba cytowań 10 (bez autocytowań 5)

9) A.Jaroń✉, Z. Żurek, **P. Batys**, "Impact of iron powder pressing temperature on high-temperature corrosion of the obtained sinters", Archives of Foundry Engineering, 10 (2010) 105-110
(punkty MNiSW: 6), liczba cytowań 0

10) A.Jaroń✉, Z. Żurek, **P. Batys**, " High-temperature corrosion of porous Invar sinters", Ochrona przed Korozją, 53 (2010) 578-581
(punkty MNiSW: 6), liczba cytowań 0

5. **Wykaz osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).**

brak

6. **Wykaz publicznych realizacji dzieł artystycznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).**

brak

7. **Informacja o wystąpieniach na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych.** (osoba prezentująca)

7.1. Wystąpienia ustne po uzyskaniu stopnia doktora

- **P. Batys**, S.J. Nikkhah, Y. Zhang, S. Lalwani, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, "Water binding and mobility in polyelectrolyte complexes", American Physical Society March Meeting 2020, March 2–6, 2020; Denver, Colorado, USA

- J. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, **P. Batys**, "Water's effect on the glass transition and dynamic mechanical properties of polyelectrolyte complexes", American Physical Society March Meeting 2020, March 2–6, 2020; Denver, Colorado, USA

- J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, P.S. Martinez, **P. Batys**, "Time-Temperature and Time-Water Superposition Principles Applied to Poly (allylamine)/Poly (acrylic acid) Complexes", 2019 AIChE Annual Meeting, November 10-15, 2019, Hyatt Regency, Orlando, USA

- O. Cusola, S. Kivisto, S. Vierros, **P. Batys**, M. Ago, B. Tardy, L.G.G. Greca, M. Blanca Roncero, M. Sammalkorpi, O. Rojas, "Stratification of lignin particles in waterborne systems via evaporation-induced self-assembly", American Chemical Society 257, 31.03-03.04, 2019 Orlando, FL, USA

- **P. Batys**, Y. Zhang, J.T. O'Neal, F. Li, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, "The molecular origin of the glass transition in polyelectrolyte assemblies", 61 Zjazd PTChem, 17-21.09.2018, Kraków, Polska

- Y. Zhang, **P Batys**, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, "Thermal transitions in hydrated PDADMA-PSS complexes", 255th ACS National Meeting & Exposition, 18-22.03.2018, New Orlean, LA, USA

- Y. Zhang, **P. Batys**, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, "How water, salt, and pH universally influence the glass transition in polyelectrolyte complexes", 255th ACS National Meeting & Exposition, 18-22.03.2018, New Orlean, LA, USA

- Y. Zhang, J.L. Lutkenhuas, M. Sammalkorpi, **P. Batys**, "The Effect Of Water On The Thermal Transition Observed In Poly(Allylamine Hydrochloride)-Poly(Acrylic Acid) Complexes," 4th ChEGSA Annual Research Symposium, 03.2017, College Station, Texas, USA

- Y. Zhang, **P. Batys**, F. Li, J.L. Lutkenhuas, M. Sammalkorpi, "Effect of Water on the Thermal Transition Observed in Polyelectrolyte Complexes," APS March Meeting, 03.2017, New Orleans, Louisiana, USA

- Y. Zhang, J.L. Lutkenhuas, M. Sammalkorpi, **P. Batys**, "Effect of Water on the Thermal Transition Observed in Polyelectrolyte Complexes," 254th ACS National Meeting, 08.2017, Washington, DC, USA

- Y. Zhang, J.L. Lutkenhuas, M. Sammalkorpi, **P. Batys**, "The Effect of Water on the Thermal Transition Observed in Polyelectrolyte Complexes (PECs)," 6th Texas Soft Matter Meeting, 08.2017, Houston, Texas, USA

7.2. Wystąpienia ustne przed uzyskaniem stopnia doktora

- **P. Batys**, M. Nosek, P. Weroński, "Analysis of structure of layer-by-layer assemblies of spherical particles", "Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS", 2-3.07.2015, Kraków, Polska

- **P. Batys**, M. Nosek, P. Weroński, "Application of Monte Carlo method for adsorption process simulation", CCP5 Summer School 2014 – Methods in Molecular Simulations, 13-22.07.2014, Manchester, Wielka Brytania

- **P. Batys**, P. Weroński, "Controlling Structure and Surface Properties of LbL Multilayers", 27th Conference of the European Colloid and Interface Society, 1-6.09.2013, Sofia, Bułgaria

- **P. Batys**, P. Weroński, "Transport properties of layer-by-layer assemblies of spherical particles at solid/liquid interface", Interfacial Phenomena in Theory and Practice IX Scientific Workshop for Postgraduate Students, 22-27.06.2014, Sudomie, Polska

- M. Nosek, **P. Batys**, P. Weroński, M. Skoczek, "New electrochemical method for quantitative characterization of colloidal particle monolayer", Interfacial Phenomena in Theory and Practice IX Scientific Workshop for Postgraduate Students, 22-27.06.2014, Sudomie, Polska

- M. Skoczek, **P. Batys**, P. Weroński, E. Luchter-Wasylewska, "Quantitative characterization of model prostasome membrane - molecular dynamic simulations", Interfacial Phenomena in Theory and Practice IX Scientific Workshop for Postgraduate Students, 22-27.06.2014, Sudomie, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, "Surface properties of particle multilayers – numerical studies", Interfacial Phenomena in Theory and Practice VIII Summer School for Graduate Students, 23-29.06.2013, Sudomie, Polska

- M. Nosek, **P. Batys**, P. Weroński, G. Mordarski, "Effect of a densely packed monolayer on the limiting diffusion current – experimental view", Interfacial Phenomena in Theory and Practice VIII Summer School for Graduate Students, 23-29.06.2013, Sudomie, Polska

- P. Weroński, M. Nosek, **P. Batys**, "Effect of a densely packed monolayer on the limiting diffusion current – theoretical modeling", Interfacial Phenomena in Theory

and Practice VIII Summer School for Graduate Students, 23-29.06.2013, Sudomie, Polska

- M. Skoczek, **P. Batys**, P. Weroński, E. Luchter-Wasylewska, ”Molecular dynamics simulations of high-cholesterol containing membrane vesicles”, Interfacial Phenomena in Theory and Practice VIII Summer School for Graduate Students, 23-29.06.2013, Sudomie, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, ”Numerical studies of self-assembled multilayers”, Interfacial Phenomena in Theory and Practice VII Scientific workshop for postgraduate students, 24-30.06.2012, Sudomie, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, ”Structure and Transport Properties of Colloidal Multilayers”, ISD Scientific Workshop, 13-19.11.2011, Zakopane, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, ”Characteristics of structure and transport properties of spherical particles multilayer”, HITS 2011 – Application of theory in molecular studies, 18-20.05.2011, Kraków, Polska

- A. Jaroń, Z. Żurek, **P. Batys**, ”Impact of iron powder pressing temperature on high-temperature corrosion of the obtained sinters”, Quality and innovation in materials engineering, technology and construction of machinery, 23-25.09.2010, Zakopane, Polska

7.3. Postery po uzyskaniu stopnia doktora

- M. Morga, Z. Adamczyk, D. Kosior, **P. Batys**, “Mechanisms of poly-L-lysine adsorption at solid/liquid interfaces determined by electrokinetic techniques”, 9th International Colloids Conference, 16-19 June 2019, Sitges, Barcelona, Hiszpania

- A. Bratek-Skicki, J. Van Lindt, **P. Batys**, D. Maes, P. Tompa, “A generic approach for studying the kinetics of liquid-liquid phase separation of ALS-linked proteins”, 44th FEBS Congress, 6-11 July 2019, Krakow, Polska

- **P. Batys**, P. Mohammadi, L. Lemetti, D. Fedorov, M. Linder, M. Sammalkorpi, “Phase separation of artificial silk proteins”, 61 Zjazd PTChem, 17-21.09.2018, Kraków, Polska

- **P. Batys**, E. Yildirim, R. Zhang, Y. Zhang, H. Antila, J. O’Neal, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, “Thermal transition of hydrated polyelectrolyte complexes and multilayers at molecular level”, International Symposium on Polyelectrolytes 2018, 26-31.08.2018, Wageningen, Holandia

- **P. Batys**, Y. Zhang, S. Kivistö, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, “Water Binding in Polyelectrolyte Complexes: Effect of Hydration and Temperature”, International Symposium on Polyelectrolytes 2018, 26-31.08.2018, Wageningen, Holandia

- **P. Batys**, P. Mohammadi, L. Lemetti, D. Fedorov, M. Linder, M. Sammalkorpi, “Coacervation of Artificial Silk Proteins”, International Symposium on Polyelectrolytes 2018, 26-31.08.2018, Wageningen, Holandia

- **P. Batys**, P. Mohammadi, D. Fedorov, M. Linder, M. Sammalkorpi, "A Closer Look into Artificial Silk Proteins in Aqueous Solutions", Computational Chemistry Days 2018, 28-29.05.2018, Helsinki, Finlandia

- A. Leino, S. Kivistö, **P. Batys**, M.Sammalkorpi, "Molecular dynamics simulations of the effect of solvent on polyelectrolyte interactions", Computational Chemistry Days 2018, 28-29.05.2018, Helsinki, Finlandia

- **P. Batys**, Y. Zhang, J. L. Lutkenhaus, and M. Sammalkorpi, "Water behaviour around intrinsic and extrinsic ion pairs in hydrated polyelectrolyte complexes", 7th International Colloids Conference, 18–21.06.2017, Sitges, Hiszpania

- **P. Batys**, M. Nosek, M. Skoczek, P. Weroński, "Voltammetric studies of thin films transport properties", 16th International Conference on Organized Molecular Films, 25-29.07.2017, Helsinki, Finlandia

- **P. Batys**, R. Zhang, M. Sammalkorpi "Understanding Hydrated Polyelectrolyte Complexes and Multilayers via Molecular Simulations", 16th International Conference on Organized Molecular Films 25-29.07.2017, Helsinki, Finlandia

- P. Weroński, **P. Batys**, M. Nosek, M. Skoczek, "Effective diffusivity of colloidal particle multilayers", 29th Conference of the European Colloid and Interface Society, 6-11.09.2015, Bordeaux, Francja

- A. Michna, Z. Adamczyk, **P. Batys**, "Revealing the formation and stability of pdadmac monolayers on mica via electrokinetic and colloid enhancement techniques", 29th Conference of the European Colloid and Interface Society, 6-11.09.2015, Bordeaux, Francja

7.4. Postery przed uzyskaniem stopnia doktora

- M. Skoczek, **P.Batys**, P. Weroński, "Molecular dynamics study of phospholipid bilayers with high cholesterol content", "Gordon Research Conference – Mechanisms of Membrane Transport", , 28.06-3.07.2015, Lewiston, USA.

- M. Skoczek, **P. Batys**, P. Weroński, "Molecular dynamics simulation of prostasome membrane", "Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS", 2-3.07.2015, Kraków, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, M. Nosek, "Synthesis and structural characterization of quasi-hexagonal monolayers", "Na granicy powierzchni i światła: Adsorpcja i spektroskopia SERS", 2-3.07.2015, Kraków, Polska

- P. Weroński, **P. Batys**, M. Nosek, M. Skoczek, "Synthesis and quantitative characterization of non-coductive colloidal particle multilayers", 2015 AEESP Research and Education Conference, Yale University, June 13-16, 2015, New Haven, CT, USA

- **P. Batys**, M. Skoczek, P. Weroński, "Cholesterol-phospholipid interactions in biological membranes at high cholesterol concentration", CCP5 Summer School 2014 – Methods in Molecular Simulations, 13-22.07.2014, Manchester, Wielka Brytania

- **P. Batys**, P. Weroński, M. Nosek, ”Multilayer films of colloidal particles - structure analysis”, 4th Summer Symposium on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, 15-18.06.2014, Poznań, Polska

- M. Nosek, **P. Batys**, M. Skoczek, P. Weroński, ”Novel method for study of thin porous layers”, 4th Summer Symposium on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, 15-18.06.2014, Poznań, Polska

- M. Skoczek, **P. Batys**, P. Weroński, ”Understanding cholesterol effect on biological membranes: cholesterol-phospholipid interactions at high cholesterol concentration”, 4th Summer Symposium on Nanomaterials and Their Application to Biology and Medicine, 15-18.06.2014, Poznań, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, ”LbL assemblies with well-defined transport properties – numerical studies”, International Soft Matter Conference 2013, 15-19.09.2013, Rome, Włochy

- M. Nosek, **P. Batys**, M. Skoczek, P. Weroński, ”Application of Cyclic Voltammetry Technique for Characterization of Nano- and Microsphere Monolayers”, International Soft Matter Conference 2013, 15-19.09.2013, Rome, Włochy

- P. Weroński, **P. Batys**, M. Nosek, ”Voltammetric Method for Determining Coverage of Densely Packed Spherical Particle Monolayer – Theoretical Study”, 27th Conference of the European Colloid and Interface Society, 1-6.09.2013, Sofia, Bułgaria

- M. Nosek, **P. Batys**, P. Weroński, G. Mordarski, ”Voltammetric Method for Determining Coverage of Densely Packed Spherical Particle Monolayer – Experimental View”, 27th Conference of the European Colloid and Interface Society, 1-6.09.2013, Sofia, Bułgaria

- M. Nosek, P. Weroński, **P. Batys**, E. Bielańska, ”Effect of Particle Polydispersity on Limiting Diffusion Current”, 27th Conference of the European Colloid and Interface Society, 1-6.09.2013, Sofia, Bułgaria

- M. Skoczek, **P. Batys**, P. Weroński, E. Luchter-Wasylewska, ”High-cholersterol-induced modifications in phospholipid bilayers: a simulation study”, Current Trends in Theoretical Chemistry VI, 1-5.09.2013, Kraków, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, ”Effect of various single-layer coverage on nanoparticle multilayer properties”, 3rd Summer Symposium on Nanomaterials and their application to Biology and Medicine, 16-19.06.2013, Poznań, Polska

- M. Nosek, **P. Batys**, M. Skoczek, P. Weroński, ”Cyclic voltammetry as an efficient tool for characterization of nanoparticle films”, 3rd Summer Symposium on Nanomaterials and their application to Biology and Medicine, 16-19.06.2013, Poznań, Polska

- M. Skoczek, P. Weroński, E. Luchter-Wasylewska, **P. Batys**, „Molecular dynamics simulations of the structure of prostasome bilayer”, Third Conference of Medicine and Pharmacy Faculties’ Doctoral Students, 9-10.05.2013, Kraków, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, ”Model surfaces of controlled roughness”, 3rd International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, 27.05-1.06.2012, Kraków, Polska

- **P. Batys**, P. Weroński, ”Computer modeling layer-by-layer catalysts”, XLIV Polish Annual Conference on Catalysis, 14-16.03.2012, Kraków, Polska

- A. Jaroń, Z. Żurek, **P. Batys**, ”High temperature corrosion resistance of porous sintered Invar”, XV National Scientific and Technical Symposium "New Achievements in Research and Engineering Corrosion”, 24-26.11.2010, Poraj, Polska

Podsumowując, wygłosiłem **9** referatów oraz byłem współautorem **16** innych prezentacji wygłoszonych na konferencjach międzynarodowych i krajowych. Ponadto byłem autorem lub współautorem **33** posterów z czego **19** było przedstawionych na konferencjach międzynarodowych.

8. Informacja o udziale w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji.

brak

9. Informacja o uczestnictwie w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.

Obecnie realizowany grant:

2019 – 2022 – Kierownik grantu: „Od pojedynczej cząsteczki do inteligentnego materiału - zrozumienie tworzenia się i właściwości kompleksów polipeptydów” (Sonata, NCN)

Udział w zakończonych projektach badawczych:

2019 – 2020 - Kierownik grantu: “Physicochemical characterization of stimuli-responsive smart-materials” (Miniatura, NCN)

2017 – 2018 - Wykonawca w grancie: “The New Road to Silk: Bio-based production of silk-like materials” (Academy of Finland)

2017 – 2018 - Wykonawca w grancie: “Water and Salt Effects in Polyelectrolyte Complexes” (Academy of Finland)

2016 – 2017 - Wykonawca w grancie: “Thermal Transitions in Polyelectrolyte Complexes and Multilayers” (National Science Foundation & Academy of Finland)

2015 - Kierownik grantu: “Computational microscopy” (Grant Dziekański, AGH)

2013 – 2014 - Wykonawca w grancie: “Functional Nano- and Microparticles, Synthesis and Application in Innovative Materials and Technologies (FUNANO)” (POIG)

2010 – 2012 - Wykonawca w grancie: „Theoretical and experimental analysis of the porosity of multilayer spherical colloidal particles” (MNiSW)

10. Członkostwo w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.

brak

11. **Informacja o odbytych stażach w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.**

03.2016 – 08.2018 – staż podoktorski, Department of Chemistry and Materials Science, School of Chemical Engineering, Aalto University, Finlandia

09.2017 – 08.2018 – staż podoktorski, Department of Bioproducts and Biosystems, School of Chemical Engineering, Aalto University, Finlandia

01.2019 – staż naukowy, Aalto University (2 tygodnie)

03.2019 – staż naukowy, Technical University of Munich (1 tydzień)

04-05.2019 – staż naukowy, Texas A&M University (1 miesiąc)

11.2019 – staż naukowy, Vrije Universiteit Brussel, Belgia (1 tydzień)

12. **Członkostwo w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.)**

Członek komisji recenzentów czasopisma „Polymer" (IF: 3.426), wydawnictwo MDPI

13. **Informacja o recenzowanych pracach naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.**

Recenzowałem ok 10-15 prac w czasopismach międzynarodowych

14. **Informacja o uczestnictwie w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych.**

Udział w programie „Erasmus+ Mobility Programme" – w ramach którego odbyłem wizyty naukowe na Aalto University (2 tygodnie), Technical University of Munich (1 tydzień) oraz Vrije Universiteit Brussel, Belgium (1 tydzień).

15. **Informacja o udziale w zespołach badawczych, realizujących projekty inne niż określone w pkt. II.9.**

brak

16. **Informacja o uczestnictwie w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań, wnioski o przyznanie nagród naukowych, wnioski w innych konkursach mających charakter naukowy lub dydaktyczny.**

brak

III. INFORMACJA O WSPÓŁPRACY Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

brak

IV. INFORMACJE NAUKOMETRYCZNE (baza Scopus, na dzień 25.10.2020)

1. **Informacja o punktacji Impact Factor.**

Łączny Impact Factor (**24** publikacje na liście JCR): **103,179** (zgodnie z rokiem opublikowania)

2. **Informacja o liczbie cytowań publikacji wnioskodawcy, z oddzielnym uwzględnieniem autocytowań.**

Liczba cytowań: **205** (bez autocytowań **149**)

3. **Informacja o posiadanym indeksie Hirscha.**

H-index: **9**

4. **Informacja o liczbie punktów MNiSW.**

Suma punktów MNiSW przed rokiem 2017 (skala 0-50 pkt.): **387**
Suma punktów MNiSW po 2017 (skala 0-200 pkt.): **1700**

Informacje zawarte w pkt. IV powinny wskazywać również na bazę danych, na podstawie której zostały podane.
Przy wyborze tej bazy należy zwracać uwagę na specyfikę dziedziny i dyscypliny naukowej, w której kandydat ubiega się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.
Rada Doskonałości Naukowej informuje, że podawanie danych naukometrycznych – w opinii Rady Doskonałości Naukowej – jest wskazane i zalecane, wynika to także ze stosowanej powszechnie praktyki przez samych kandydatów ubiegających się o awans naukowy. Należy jednak podkreślić, że podane we wnioskach o wszczęcie postępowania awansowego dane naukometryczne nie mogą stanowić kryterium oceny dorobku naukowego Kandydata dla podmiotów doktoryzujących, habilitujących oraz samej Rady Doskonałości Naukowej, organów prowadzących postępowania w sprawie nadania stopnia lub tytułu. Zadaniem tych organów jest przede wszystkim ocena ekspercka dorobku naukowego Kandydata ubiegającego się o awans naukowy, zaś decyzja o nadaniu stopnia lub tytułu nie powinna być uzależniona od podania tych danych.

[redacted]
.....
(podpis wnioskodawcy)