



## Recenzja rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego dr. Kajetana Koperwasa

Dr Kajetan Koperwas uzyskał stopień magistra fizyki w roku 2011 oraz stopień doktora nauk fizycznych w roku 2016 na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach. Promotorem jego rozprawy doktorskiej, zatytułowanej *Dynamiczne i termodynamiczne aspekty przejścia szklistego*, był prof. dr hab. Marian Paluch.

Dr Kajetan Koperwas posiada bogaty dorobek naukowy, obejmujący 41 prac opublikowanych w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Łączny wskaźnik wpływu artykułów habilitanta wynosi 176.623. Liczba cytowań (bez autocytowań) wynosi 373 (Web of Science) i 348 (Scopus), zaś indeks Hirscha wynosi odpowiednio 13 (Web of Science) i 12 (Scopus). W mojej opinii, przytoczone dane naukometyczne potwierdzają znaczący wkład dr. Koperwasa w dziedzinie szeroko pojętej fizyki molekularnej.

### GŁÓWNE OSIĄGNIĘCIE

Jako główne osiągnięcie dr Kajetan Koperwas przedłożył cykl dziewięciu artykułów naukowych pt. *Określenie znaczenia oddziaływań międzycząsteczkowych dla dynamiki molekularnej i stabilności termodynamicznej przechłodzonych cieczy van der Waalsa za pomocą symulacyjnych badań cieczy prostych i modelowych systemów quasi-rzeczywistych*.

Pozycje przedstawione jako główne osiągnięcie obejmują:

A1 **Koperwas K.**, Adrjanowicz K., Wojnarowska Z., Jędrzejowska A., Knapik J., Paluch M., *Glass-Forming Tendency of Molecular Liquids and the Strength of the Intermolecular Attractions*, Sci. Rep. 2016, 6 (1), 36934, **IF 5.228**

A2 **Koperwas K.**, Affouard F., Gerges J., Valdes L.-C., Adrjanowicz K., Paluch M., *Influence of Pressure on the Crystallization of Systems Characterized by Different Intermolecular Attraction*, Phys. Rev. B 2017, 96 (22), 224106, **IF 3.836**

A3 **Koperwas K.**, Grzybowski A., Paluch M., *The Effect of Molecular Architecture on the Physical Properties of Supercooled Liquids Studied by MD Simulations: Density Scaling and Its Relation to the Equation of State*, J. Chem. Phys. 2019, 150 (1), 014501, **IF 2.834**

A4 **Koperwas K.**, Adrjanowicz K., Grzybowski A., Paluch M., *The Role of the Dipole Moment Orientations in the Crystallization Tendency of the van der Waals Liquids - Molecular Dynamics Simulations*, Sci. Rep. 2020, 10 (1), 283, **IF 4.011**

A5 **Koperwas K.**, Grzybowski A., Paluch M., *Exploring the Connection between the Density-Scaling Exponent and the Intermolecular Potential for Liquids on the Basis of Computer Simulations of Quasireal Model Systems*, Phys. Rev. E 2020, 101 (1), 012613, **IF 2.353**

A6 Koperwas K., Grzybowski A., Paluch M., *Virial—Potential-Energy Correlation and Its Relation to Density Scaling for Quasireal Model Systems*, Phys. Rev. E 2020, 102 (6), 62140, **IF 2.353**

A7 Koperwas K., Kaśkosz F., Affouard F., Grzybowski A., Paluch M., *The Role of the Diffusion in the Predictions of the Classical Nucleation Theory for Quasi-Real Systems Differ in Dipole Moment Value*, Sci. Rep. 2022, 12 (1), 9552, **IF 4.380**

A8 Koperwas K., Paluch M., *Computational Evidence for the Crucial Role of Dipole Cross-Correlations in Polar Glass-Forming Liquids*, Phys. Rev. Lett. 2022, 129 (2), 25501, **IF 9.161**

A9 Paluch M., Koperwas K., Wojnarowska Z., *Determination of self and cross contributions to the dipole-dipole correlations function from analysis of dielectric measurements*, J. Mol. Liq. 2023, 382, 121907, **IF 6.000**

W rozdziale zatytułowanym *Krystalizacja*, habilitant przedstawia wyniki swoich rozważań nad wpływem oddziaływań międzycząsteczkowych na tendencję cieczy molekularnych do krystalizacji lub tworzenia szkła. W szczególności, w artykule A1 przebadano eksperymentalnie dwie substancje mocno zbliżone budową chemiczną, które jednak wykazują diametralnie różne zachowanie podczas przechładzania. W rezultacie, w artykule zasugerowano, że powodów obserwowanych rozbieżności w stabilności badanych substancji należy upatrywać w różnej wartości momentów dipolowych molekuł, a co za tym idzie, w różnej roli oddziaływań dipolowych. W celu teoretycznego zbadania wspomnianych rozbieżności, habilitant przeprowadził symulacje modelowych cieczy różniących się wyłącznie członem przyciągającym, który wchodzi w skład potencjału opisującego oddziaływania międzycząsteczkowe. Habilitant wykorzystał również przewidywania Klasycznej Teorii Nukleacji do wyjaśnienia obserwowanego w eksperymencie zachowania obu materiałów. Analiza uzyskanych wyników prowadzi do wniosku, że wielkość przyciągania międzycząsteczkowego znacząco wpływa na krystalizację cieczy molekularnych poprzez zmianę położenia maksimum tempa zarodkowania i wzrostu kryształu. W konsekwencji uzyskane wyniki sugerują, że ciecze van der Waalsa o silniejszym przyciąganiu są łatwiejsze do przechłodzenia. Wniosek ten jest istotny dla zrozumienia problemu stabilności termodynamicznej materiałów w temperaturach niższych od temperatury topnienia.

Badania i wyniki opisane w artykule A2 są kontynuacją tematyki podjętej w artykule A1. Zbadano w nim wpływ oddziaływań przyciągających między molekułami na proces krystalizacji cieczy van der Waalsa w różnych warunkach izobarycznych. W publikacji, przy użyciu symulacji komputerowych dynamiki molekularnej oraz metody fluktuacji kapilarnych, habilitant między innymi obliczył wartość energii swobodnej interfejsu ciecz-kryształ ( $\gamma_m$ ) oraz siłę napędzającą krystalizację ( $\Delta G_v$ ). Przeprowadzona analiza wyników obliczeń pokazuje, że wzrost siły napędzającej krystalizację spowodowany wzrostem przyciągania międzycząsteczkowego jest spodziewany niezależnie od badanych warunków izobarycznych, oraz że wzrost ciśnienia implikuje większe maksymalne wartości  $\Delta G_v$ . Habilitant wywnioskował również, że układy cechujące się silniejszym przyciąganiem międzycząsteczkowym charakteryzują się większymi wartościami  $\gamma_m$ . Ponadto, symulacje pokazały, że niezależnie od siły przyciągania, wzrost ciśnienia prowadzi do spadku  $\gamma_m$ , przy

czym efekt ten jest najsilniejszy dla układu z najsłabszym przyciąganiem międzycząsteczkowym. Jak zaznaczył habilitant, kluczową kwestią w wyjaśnieniu obserwowanego zachowania  $\nu_m$  jest entropia konfiguracyjna oraz związana z nią liczba dostępnych dla cząsteczek konfiguracji, która jest redukowana przez międzymolekularne oddziaływania odpychające pochodzące od najbliższych sąsiadów. Wskazał on, że w warunkach topnienia wspomniana siła odpychająca rośnie wraz z kompresją układu, co sprawia, że redukcja entropii konfiguracyjnej cząsteczek cieczy jest większa w wyższym ciśnieniu. W podsumowaniu tej części rozprawy, dr Kajetan Koperwas stwierdza, że zarówno tempo nukleacji, jak i całkowite tempo krystalizacji rozważanych układów, wykazują widoczne zmiany spowodowane różną wielkością przyciągania międzycząsteczkowego, podczas gdy tempo wzrostu kryształu jest znacznie mniej czułe na wzrost tego przyciągania.

Ważnym i nowatorskim krokiem w pracy naukowej dr. Koperwasa było przejście od badań cieczy złożonych z cząsteczek idealnie symetrycznych do układów cząsteczek charakteryzujących się anizotropią struktury, co okazało się wyjątkowo trafnym posunięciem. W publikacji A4 habilitant przeprowadził symulacje dynamiki molekularnej modelowych quasi-rzeczywistych molekuł w kształcie rombu, posiadających momenty dipolowe o różnej wartości i skierowane wzdłuż jednej z przekątnych molekuł. Symulacje izobarycznego chłodzenia wykazały, że spośród wszystkich badanych układów tylko molekuły z dużym momentem dipolowym skierowanym wzdłuż ich krótszej przekątnej wykazują skokową tendencję do krystalizacji. Formowanie fazy krystalicznej przez te cząsteczki potwierdza również analiza radialnej funkcji dystrybucji oraz globalnego parametru porządku. Parametr ten dla układu, który krystalizuje, wykazuje skokowy wzrost podczas chłodzenia. W pozostałych przypadkach wzrost wartości parametru porządku wynikający z ochładzania cieczy zatrzymuje się w pewnej temperaturze, co świadczy o zahamowaniu dynamiki molekularnej i koresponduje z przejściem ciecz-szkło. W podsumowaniu dr. Kajetan Koperwas konkluduje, że stabilność termodynamiczna cieczy istotnie zależy nie tylko od wartości bezwzględnej momentu dipolowego cząsteczek, ale także od orientacji tego momentu. Według niego (z czym się całkowicie zgadzam), wynik ten jest istotny nie tylko z perspektywy badań eksperymentalnych, ale także wyznacza obiecujący kierunek dalszych prac teoretycznych nad zjawiskiem krystalizacji. Sugeruje on, że modele cieczy, w których moment dipolowy cząsteczek jest prostopadły do ich najdłuższej osi molekularnej, stanowią obiecujący obiekt badań nad krystalizacją. W szczególności, układy takie są odpowiednie do przeprowadzania prac weryfikacyjnych opisu teoretycznego przemiany ciecz-kryształ.

W artykule A7 habilitant przeprowadził symulacje dynamiki molekularnej dwóch modelowych układów molekuł romboidalnych, charakteryzujących się momentem dipolowym zorientowanym wzdłuż krótszej przekątnej rombu. Jak pokazano w pracy A4, taka orientacja momentu dipolowego sprzyja krystalizacji. Numeryczny eksperyment izobaryczny wykazał, że w porównaniu do układu molekuł z mniejszym momentem dipolowym (układ I), układ molekuł z większym momentem dipolowym (układ II) krystalizuje w wyższych temperaturach. Następnie, na bazie Klasycznej Teorii Nukleacji habilitant wykorzystał dane symulacyjne do obliczenia współczynników tempa nukleacji ( $N$ ), oraz wzrostu kryształu ( $U$ ). Kluczowym wnioskiem płynącym z przewidywań Klasycznej Teorii Nukleacji dla obydwu układów jest to, że w warunkach termodynamicznych, w których układ I krystalizuje, zarówno  $N$ , jak i  $U$  dla układu II są znacznie wyższe. Zgodnie z tą teorią, układ II również powinien krystalizować w omawianych warunkach termodynamicznych. Jednakże, krystalizację tego układu obserwuje się dopiero w temperaturze niższej o około 25 K. Różnice

te zainspirowały habilitanta do dokładniejszej analizy procesu krystalizacji badanych układów. W swoim artykule habilitant wyjaśnia te różnice, koncentrując się na mobilności cząsteczek, która wyraźnie wpływa na wartości  $N$  i  $U$ . Główną konkluzją, która została przedstawiona w publikacji, jest stwierdzenie, że decydującym czynnikiem różnicującym przewidywania Klasycznej Teorii Nukleacji od wyników symulacji jest znacząca różnica w wartościach współczynnika dyfuzji. Na tej podstawie habilitant sugeruje również, że przyszłe modyfikacje Klasycznej Teorii Nukleacji powinny skupić się na roli dynamiki molekularnej w procesie tworzenia kryształu.

W rozdziale zatytułowanym *Skalowanie gęstościowe dynamiki molekularnej*, dr Kajetan Koperwas przedstawia wyniki swoich badań dotyczących ogólnej koncepcji skalowania gęstościowego dynamiki molekularnej cieczy. W artykule A3, habilitant podjął intrygujący problem związany z różnicą między gęstościowym wykładnikiem skalującym ( $\gamma$ ) a wykładnikiem równania stanu ( $\gamma_{EOS}$ ), która jest obserwowana w układach rzeczywistych. Biorąc pod uwagę, że anizotropia oddziaływań stanowi jedną z głównych różnic między prostymi modelami cząsteczek a rzeczywistymi substancjami molekularnymi, habilitant przeprowadził symulacje anizotropowych molekuł romboidalnych, zarówno z uwzględnieniem, jak i pominięciem momentu dipolowego. Wykonane obliczenia dla obydwu układów potwierdziły skalowanie danych wolumetrycznych oraz skalowanie gęstościowe współczynników dyfuzji, a także relację  $\gamma_{EOS} > \gamma$ . Uzyskane wyniki dowodzą również, że dodanie momentu dipolowego, a zatem zwiększenie anizotropii oddziaływań prowadzi do większej rozbieżności między obydwoma wykładnikami. W następnym kroku habilitant przeanalizował relację wykładników skalujących z potencjałem oddziaływań międzycząsteczkowych. Bazując na obserwacji, że skalowanie danych wolumetrycznych jest ściśle związane z kompresją układu w stałej temperaturze, a skalowanie gęstościowe odnosi się do dyfuzji, habilitant zapostulował, że efektywne potencjały opisujące oddziaływania między cząsteczkami mogą się różnić w obu przypadkach. Następnie, wykorzystując ten pomysł, habilitant oszacował efektywne potencjały, które zarządzają zarówno procesem dyfuzji, jak i kompresji, dopasowując do nich funkcję zgodną z odwrotnym prawem potęgowym oraz wykładnikiem odpowiadającym wartościom  $\gamma_{EOS}$  i  $\gamma$ . Otrzymane wyniki dowodzą, że w przypadku procesu dyfuzji zdecydowanie lepsze dopasowanie otrzymuje się przy użyciu  $m=3\gamma$ , a dla efektywnego potencjału odpowiedzialnego za kompresję układu dla  $m=3 \gamma_{EOS}$ .

Efektywny potencjał międzycząsteczkowy i wykładniki skalowania gęstościowego są również tematem artykułu A5. Zbadano w nim nie tylko molekuły romboidalne, ale także nową modelową molekułę, której atomy są ułożone w kształt tetraedronu. Wykonane symulacje pokazują, że już sama różnica w architekturze molekuł sprawia, że wykładniki skalujące  $\gamma$  są różne dla obu układów. W publikacji habilitant założył, że aby sensownie oszacować efektywny potencjał międzycząsteczkowy, należy dla wszystkich atomów wybranej cząsteczki wyznaczyć potencjał pochodzący od wszystkich atomów innej molekuły, zsumować otrzymane potencjały i wykreślić je w funkcji odległości między środkami mas analizowanych molekuł. Otrzymane w ten sposób potencjały w warunkach charakteryzujących się większą dyfuzją są większe oraz rejestrowane są na mniejszych odległościach między molekułami. Przeprowadzona w artykule analiza prowadzi do wniosku, że największy wpływ na kształt i położenie uśrednionego efektywnego potencjału międzycząsteczkowego ma temperatura układu. Następnie, habilitant dochodzi do wniosku, że również efektywny potencjał międzycząsteczkowy wspólny dla wszystkich warunków

termodynamicznych może być opisany przez funkcję zgodną z odwrotnym prawem potęgowym i posiadającą identyczną wartość wykładnika  $m$  w członie odpychającym. Na bazie analizy tego potencjału dochodzi on do ogólnego wniosku, że z punktu widzenia skalowania gęstościowego, wartości wykładnika  $\gamma$ , a w konsekwencji związku między dynamiką i termodynamiką, najistotniejsze są oddziaływania zachodzące pomiędzy najbliższymi sąsiadami.

Publikacja A6 poświęcona jest korelacji między wirialem ( $W$ ) układu a jego energią potencjalną ( $U$ ) dla quasi-rzeczywistych cieczy zawierających molekuly romboidalne. Korelacja ta jest podstawowym pojęciem w teorii izomorfów, która wyjaśnia przyczynę skalowania gęstościowego dla bardziej skomplikowanych modeli niż układy miękkich sfer. Analiza wyników symulacji dynamiki molekularnej wykazała, że zredukowane czasy relaksacji oraz współczynnik dyfuzji dla rozważanego przez habilitanta układu spełniają prawo skalowania gęstościowego, z wykładnikiem  $\gamma=6.173$ . Tak więc, zgodnie z teorią izomorfów, układ ten powinien się cechować silną korelacją  $WU$ . Jednakże, jak podkreśla habilitant, uzyskane dane nie układają się w oczekiwaną liniową zależność, a współczynnik korelacji Pearsona wynosi zaledwie 0.156. Analizując uzyskane wyniki, habilitant wyjaśnia, że w przypadku cząsteczek wieloatomowych korelacja  $WU$  nie może występować ze względu na obecność oddziaływań wewnątrzcząsteczkowych, które przyczyniają się do całkowitego wiriału i energii potencjalnej układu. Natomiast, korelacja ta jest nadal obserwowana, jeśli wziąć pod uwagę wkłady do  $W$  i  $U$  pochodzące od oddziaływań międzycząsteczkowych. Jednakże, w tym przypadku uzyskana wartość wykładnika skalującego wynosi  $\gamma_{UW}=4.758$  i jest zdecydowanie mniejsza od wcześniej obliczonej wartości  $\gamma=6.173$ . Na tej podstawie habilitant dochodzi do kluczowego wniosku, że wyniki przeprowadzonych symulacji quasi-realnego układu molekuł romboidalnych sugerują, że w przypadku substancji rzeczywistych wykładnik skalujący nie powinien być utożsamiany ze współczynnikiem nachylenia zależności wiriału od energii potencjalnej. Następnie, mając na uwadze wyniki swoich wcześniejszych prac, habilitant przeprowadził analizę korelacji  $WU$  w zależności od odległości międzycząsteczkowych. Okazuje się, że uzyskana w ten sposób wartość wykładnika  $\gamma_{UW}$  nie jest stała, jeśli analizować korelację  $WU$  dla molekuł znajdujących się w sferach o coraz większym promieniu. Jak wyjaśnia habilitant niemonotoniczna zmienność wykładnika  $\gamma_{UW}$  ma swoje źródło w tendencji anizotropowych molekuł do przyjmowania pewnych preferowanych wzajemnych orientacji. Następnie habilitant obliczył wartości współczynnika nachylenia liniowej zależności wiriału od energii potencjalnej dla molekuł znajdujących się na konkretnych odległościach. W tym przypadku, wyniki uzyskane dla różnych warunków termodynamicznych są identyczne, co jest spójne z obserwacją, że jedna wartość  $\gamma$  pozwala skalować dane dynamiczne dla różnych temperatur i ciśnień. Kluczowym wynikiem otrzymanym przez habilitanta jest obserwacja, że istnieje przedział odległości międzycząsteczkowych, dla których  $\gamma_{UW} = \gamma = 6.173$ .

W rozdziale *Kształt funkcji odpowiedzi* dr Kajetan Koperwas prezentuje wyniki badań nad korelacjami typu dipol-dipol w modelowych cieczach polarnych. W szczególności skupił się on na symulacjach dynamiki molekularnej cieczy składających się z obdarzonych momentem dipolowym molekuł o kształcie rombu i tetraedronu. W publikacji A8 habilitant odniósł się do różnic w pochodzeniu widm obserwowanych w eksperymentach BDS (ang. Broadband Dynamic Spectroscopy) i DDLS (ang. Dynamic Depolarized Light Scattering). Przeprowadzone obliczenia wykazują istnienie bezpośredniego związku między spektrum dielektrycznym a korelacjami pomiędzy momentami dipolowymi molekuł romboidalnych. Dla układu słabo polarnego znaleziona funkcja korelacji całkowitego momentu dipolowego

układu jest w całości zdominowana przez wkład pochodzący od korelacji własnych. Natomiast, w cieczach silnie polarnych, całkowita funkcja korelacji między dipolami jest w znacznym stopniu zdominowana przez człon krzyżowy. Ponadto, habilitant zaobserwował, że korelacje krosowe zanikają wolniej niż korelacje własne. W konkluzji, dr Koperwas stwierdza, że powyższe obserwacje są zgodne z interpretacją pochodzenia kształtu widma BDS zaproponowaną przez grupę prof. Blochowicza. Kontynuując tę tematykę, w artykule A9 habilitant przeprowadził symulacje dynamiki molekularnej układu molekuł tetrahedralnych, które potwierdziły istnienie korelacji krzyżowych nawet pomiędzy cząsteczkami, które praktycznie są idealnie symetryczne. Tak więc eksperymenty numeryczne przeprowadzone przez dr. Koperwasę jasno wskazują, że korelacje krzyżowe między momentami dipolowymi cząsteczek mają znaczący wpływ na procesy relaksacyjne w cieczach polarnych.

Główne osiągnięcie przedstawione w rozprawie dr. Koperwasę jest rezultatem wieloletniej pracy naukowej i obejmuje artykuły autorstwa kilku badaczy. Zgodnie z oświadczeniami współautorów oraz habilitanta, jego udział w badaniach polegał na sformułowaniu hipotezy badawczej, przygotowaniu programów komputerowych do symulacji metodą dynamiki molekularnej, przeprowadzeniu tych symulacji i interpretacji uzyskanych wyników. Ponadto, habilitant zajmował się również opracowywaniem modeli teoretycznych oraz sporządzaniem manuskryptów. Na tej podstawie należy uznać, że miał on kluczowy wkład w powstawaniu zaprezentowanych publikacji. Oprócz wielu nowych wyników teoretycznych, niezaprzeczalną zaletą przedstawionego osiągnięcia jest jego powiązanie z szeregiem badań eksperymentalnych. Należy również podkreślić bardzo wysoki wskaźnik wpływu czasopism, w których te prace się ukazały. Biorąc to wszystko pod uwagę, wnioskuję, że dr. Kajetan Koperwas jest dojrzałym, samodzielnym badaczem, który z powodzeniem będzie kontynuował karierę w swojej dziedzinie zainteresowań. Posiada on zarówno zaawansowane umiejętności techniczne, które umożliwiają eksplorację złożonych układów za pomocą metod numeryczno-analitycznych, jak i szeroką wiedzę ogólną w zakresie fizyki cieczy molekularnych. Uważam, że główne osiągnięcia przedstawione w rozprawie są znaczące, ponieważ nie tylko rzucają nowe światło na tematykę cieczy molekularnych, ale również otwierają drogę do dalszych badań w tej dziedzinie. Dowodzą one nie tylko zaangażowania habilitanta w badania naukowe, ale także jego zdolności do generowania innowacyjnych rozwiązań.

#### POZOSTAŁY DOROBEK NAUKOWY

Oprócz publikacji przedstawionych jako główne osiągnięcie, dr. Kajetan Koperwas jest współautorem 32 artykułów opublikowanych w prestiżowych periodykach. Wśród nich znajdują się czasopisma z rodziny Physical Review, Journal of Physical Chemistry, Scientific Reports czy International Journal of Molecular Sciences. Szczególnie warto zauważyć, że dr. Koperwas ma na swoim koncie współautorstwo w trzech artykułach opublikowanych w Physical Review Letters, co świadczy o światowym poziomie badań prowadzonych przez habilitanta. Istotnym aspektem aktywności dr. Koperwasę są także liczne prezentacje ustne i plakatowe na międzynarodowych konferencjach naukowych.

Dorobek dr. Kajetana Koperwasę wyraźnie wskazuje, że w dotychczasowym przebiegu kariery naukowej zajmował się szeregiem zagadnień związanych z fizyką cieczy. Obejmują

one badania przejść szklistych w układach lepkich, właściwości tworzących szkła cieczy van der Waalsa oraz cieczy ograniczonych przez nanopory, a także transport jonowy oraz cieczy przechłdzone. Osiągnięcia naukowe habilitanta dotyczą między innymi wyjaśnienia wpływu warunków termodynamicznych oraz ograniczenia przestrzennego na tempo procesu krystalizacji cieczy przechłdzonej, a także wyjaśnienie pochodzenia wykładnika skalującego dla materiałów rzeczywistych. Niewątpliwie, tak szeroki wachlarz zainteresowań naukowych dr. Kajetana Koperwasa, jego zaangażowanie w prowadzenie zarówno badań eksperymentalnych, jak i teoretycznych, oraz różnorodność stosowanych przez niego metod badawczych, świadczą o jego wszechstronności i zdolności do podjęcia rozmaitych zagadnień badawczych. W mojej ocenie, cecha ta stanowi dużą zaletę, zwłaszcza w kontekście dalszego rozwoju kariery naukowej habilitanta.

Ponadto, Dr Koperwas pełnił rolę wykonawcy w pięciu krajowych projektach naukowych oraz aktywnie uczestniczył w kilkunastu prezentacjach ustnych i plakatowych na międzynarodowych konferencjach. Habilitant podczas swojej kariery naukowej odbył dwa krótkoterminowe staże na Uniwersytecie w Lille, gdzie zajmował się wyznaczaniem wartości energii swobodnej interfejsu ciecz-kryształ zarówno dla układów modelowych, jak i rzeczywistych. Jednakże, biorąc pod uwagę przyszłą aspirację do tytułu profesora, liczebność tych doświadczeń może być nieco niewystarczająca. W związku z tym, sugeruję, aby habilitant rozważył rozwinięcie współpracy międzynarodowej z innymi ośrodkami naukowymi. Taki krok nie tylko poszerzyłby jego horyzonty badawcze, ale również stanowiłby wartościowy kierunek rozwoju i umocnienia jego pozycji w dziedzinie fizyki cieczy.

#### DOROBEK DYDAKTYCZNY, ORGANIZACYJNY I POPULARYZUJĄCY NAUKĘ

Dr Kajetan Koperwas posiada również bogaty dorobek organizacyjny i działalność popularyzującą naukę. W latach 2014-2018 był członkiem komitetów organizacyjnych trzech międzynarodowych konferencji naukowych. Jego aktywność popularyzatorska obejmuje wygłoszenie popularnonaukowego wykładu pt. *Symulacje komputerowe dynamiki molekularnej – nowoczesna i niezastąpiona metoda badania materii skondensowanej*, a także udział w projektach takich jak *Uniwersytet Młodego Odkrywcy*, *Akcja Popularyzacja*, *First step in Science*, oraz szkole letniej VINCI. Ponadto, będąc pracownikiem Instytutu Fizyki Uniwersytetu Śląskiego, zaangażowany był w statutową działalność dydaktyczną.

#### PODSUMOWANIE

Uważam, że rozprawa habilitacyjna, dorobek naukowy, dydaktyczny, organizacyjny i popularyzujący naukę dr Kajetana Koperwasa w pełni spełniają wszystkie zwyczajowe i formalne kryteria dotyczące pozytywnego rozpatrzenia postępowania habilitacyjnego. Z tego względu zdecydowanie popieram jego wniosek o uzyskanie stopnia doktora habilitowanego.

*Janusz A. Klos*