

**OCENA OSIĄGNIĘĆ DR. KAJETANA KOPERWASA
W ZWIĄZKU Z POSTĘPOWANIEM HABILITACYJNYM PROWADZONYM
W INSTYTUCIE FIZYKI UNIwersYTETU ŚLĄSKIEGO W KATOWICACH**

**Ocena osiągnięć naukowych stanowiących podstawę wniosku o
uzyskanie stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk
fizycznych.**

Pan Kajetan Koperwas uzyskał stopień magistra fizyki na Wydziale Matematyki Fizyki i Chemii, Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach w roku 2011, po przedstawieniu pracy magisterskiej pt. „Skalowanie termodynamiczne modelowych i rzeczywistych cieczy przechłodzonych”. Stopień doktora nauk fizycznych ze specjalnością fizyka molekularna uzyskał w roku 2016 na tym samym Wydziale na podstawie pracy doktorskiej pt. „Dynamiczne i termodynamiczne aspekty przejścia szklistego”.

Wszystkie etapy rozwoju naukowego pana Kajetana Koperwasa, począwszy od stypendium naukowego w czasie studiów, poprzez studia doktoranckie, pracę na stanowisku adiunkta aż do chwili obecnej, gdy jest zatrudniony jako „post-doc”, odbywały się pod opieką naukową jego Mistrza, prof. dr. hab. Mariana Palucha, jako promotora i kierownika kolejnych projektów naukowych w których był zaangażowany pan Koperwas. Praca w zespole tak znakomitego naukowca otwierała możliwości szybkiego rozszerzania swojej wiedzy i umiejętności badawczych, oraz prowadzenia badań na bardzo wysokim poziomie i należy podkreślić, że pan Kajetan Koperwas znakomicie te możliwości wykorzystał, co wykażę w dalszej części recenzji. Z drugiej strony taka sytuacja stwarzała niebezpieczeństwo pewnego zawężenia tematyki badawczej, co istotnie mogłyby sugerować tytuły prac magisterskiej i doktorskiej oraz dysertacji habilitacyjnej pana Kajetana Koperwasa, wszystkie odnoszące się do zjawisk zachodzących przy przechładzaniu cieczy – zeszklenia i/lub krystalizacji. Należy jednak od razu podkreślić, że te zjawiska mają tak ogólne i ważne znaczenie, że są przedmiotem intensywnych badań od bardzo wielu lat na całym świecie, jednak ich złożoność sprawia, że mechanizmy tych procesów są dalekie od pełnego opisanie i zrozumienia.

Pan Kajetan Koperwas w swoich badaniach celnie formułował zagadnienia wymagające wyjaśnienia i takim ważnym oraz ciągle aktualnym tematem badawczym jest „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”. Jest to jest tytuł osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę wniosku o uzyskanie stopnia doktora habilitowanego na które składa się cykl 9 spójnych publikacji.

Wyżej wspomniany cykl składa się z publikacji wieloautorskich; w ośmiu z nich dr Koperwas jest pierwszym autorem i w ośmiu jest autorem korespondencyjnym; w jednej nie jest wskazany autor korespondencyjny, ale tam dr Koperwas jest pierwszym autorem. Z załączonych oświadczeń współautorów oraz deklaracji dr. Koperwasa wynika, że wkład Habilitanta w powstanie tych prac był istotny i miał charakter twórczy na wszystkich etapach powstawania dzieła, od sformułowania hipotezy badawczej, poprzez realizację badań i analizę wyników do przygotowania publikacji. Wszystkie publikacje ukazały się w dobrych lub bardzo dobrych czasopismach z listy JCR; sześć z nich ukazało się w ostatnich 4 latach, trzy w latach 2016-2019.

Ocenie osiągnięcia naukowego podlega cykl publikacji Habilitanta, ale czuję się zwolniony z obowiązku recenzowania poszczególnych publikacji, bo każda z nich została pozytywnie oceniona przez recenzentów renomowanych czasopism w jakich się ukazały. Chcę natomiast podkreślić, że wysoko oceniam spójność wyboru tych publikacji spośród 29 artykułów, które ukazały się po uzyskaniu przez dr. Koperwasa stopnie doktora. Habilitant nie uległ pokusie umieszczenia w tym cyklu większej liczby publikacji; to świadczy o jego zdolności do syntetycznej oceny swojego dorobku naukowego co jest cechą samodzielnego pracownika naukowego.

W swojej opinii skupię się na wskazaniu kilku wybranych osiągnięć, które uznaję za najcenniejsze w trzech obszarach tematycznych, jakie dr Koperwas wyróżnił w autoreferacie. W pierwszym z nich, zatytułowanym „Krystalizacja” pragnę wyróżnić bardzo przekonujący i wnikliwy sposób wykazania istotnej roli oddziaływań międzycząsteczkowych w procesie krystalizacji. Habilitant wyszedł od porównania zachowania się w procesie przechładzania dwóch substancji, węgla propylenu i 3-metylocyklopentanonu, których cząsteczki mają podobne kształty, natomiast bardzo różnią się momentami dipolowymi i w związku z tym różnią się także oddziaływaniami międzycząsteczkowymi. Dr Koperwas wykazał na podstawie symulacji komputerowych procesów nukleacji i wzrostu kryształów w modelowych materiałach o różnych oddziaływaniach międzycząsteczkowych, że krystalizacja przy przechładzaniu substancji jest możliwa tylko wtedy, gdy zakresy temperatur w których

zachodzi nukleacja i powstają zarodki krytyczne przekrywa się z zakresem temperatur w których możliwy jest wzrost kryształów. Bardzo interesującym wynikiem tych symulacji jest stwierdzenie że, wbrew intuicji, wzrost oddziaływań międzycząsteczkowych może hamować proces krystalizacji, gdyż dla silnych oddziaływań zakres temperatur w jakich zachodzi zarodkowanie i zakres temperatur w jakich możliwy jest dalszy wzrost kryształu przestają się przekrywać. Habilitant nie poprzestał na stwierdzeniu tego efektu, ale aby wyjaśnić jego mechanizm zastosował oprócz metody symulacji komputerowych także metodę fluktuacji kapilarnych, z którą zapoznał się w czasie stażu naukowego na Uniwersytecie w Lille.

Za równie ważne i o ogólnym znaczeniu uznaję także wyniki badań dr. Koperwasa nad modelowymi molekułami o takim samym, wydłużonym romboidalnym kształcie, ale obdarzonymi różnymi i różnie zorientowanymi momentami dipolowymi. Takie układy są bliższe rzeczywistym substancjom niż omawiane powyżej modelowe materiały typu Lennarda-Jonesa. Habilitant wykazał, że stabilność termodynamiczna analizowanych układów jest bardzo różna i tylko jeden z badanych modelowych materiałów wykazywał skłonność do krystalizacji.

Drugi obszar tematyczny wyróżniony przez dr. Koperwasa jest poświęcony prawu skalowania gęstościowego dynamiki molekularnej, którego stosowalność stwierdzono dla bardzo wielu różnych materiałów. Dr Koperwas w swoich badaniach skupił się m.in. na wyjaśnieniu, dlaczego w rzeczywistych substancjach typu van der Waalsa, wykładnik skalujący różni się od wykładnika występującego w równaniu stanu, mimo że obydwa parametry są powiązane z odpychającymi oddziaływaniami międzycząsteczkowymi i mogą być uważane za stałe materiałowe. Jednak równość tych dwóch parametrów stwierdzono tylko dla prostych układów modelowych, w których oddziaływania międzycząsteczkowe są opisane odwrotnym prawem potęgowym. Dr Koperwas założył, że przyczyną powyższych rozbieżności jest anizotropia oddziaływań w układach rzeczywistych i dlatego jako modelowe cząsteczki w swoich symulacjach przyjął wspomniane już powyżej romboidalne molekuły o różnych momentach dipolowych. Wyniki symulacji potwierdziły tę hipotezę, gdyż uzyskane wartości wykładnika skalującego były mniejsze od wykładnika w równaniu stanu. Habilitant nie poprzestał jednak na zweryfikowaniu hipotezy, ale przeprowadził wnikliwe badania mające na celu znalezienie ogólnej relacji pomiędzy wykładnikiem skalującym, a oddziaływaniami pomiędzy molekułami o różnych kształtach, zarówno romboidalnych, jak i w kształcie tetraedru. Stwierdził, że wartość parametru występującego w odwrotnym prawie potęgowym oddziaływań międzycząsteczkowych jest (zgodnie z przewidywaniami) równa trzykrotnej wartości wykładnika skalującego tylko jeśli analizuje się fragment potencjału dla oddziaływań jedynie pomiędzy sąsiadującymi molekułami.

Symulacje komputerowe dynamiki molekularnej dla układów romboidalnych i w kształcie tetraedru pozwoliły Habilitantowi także na podważenie zasadności wykorzystywania teorii izomorfów dla wyjaśnienia efektu skalowania gęstościowego obserwowanego w układach złożonych. Uzyskane na podstawie teorii izomorfów wartości wykładnika skalującego są niższe od oczekiwanej wartości, co dowodzi że występująca powszechnie w literaturze interpretacja sensu fizycznego tego parametru oparta na teorii izomorfów jest niewłaściwa. Jest to niewątpliwie jeden z najważniejszych wyników uzyskanych przez dr. Koperwasa.

Trzeci obszar tematyczny wyróżniony przez Habilitanta dotyczy prób wyjaśnienia przyczyn różnic kształtów pasm relaksacji strukturalnej w widmach otrzymanych techniką szerokopasmowej spektroskopii dielektrycznej (BDS) i w widmach otrzymanych techniką dynamicznego rozpraszania światła zdepolaryzowanego (DDL). Bardzo ambitnym zadaniem podjętym przez dr. Koperwasa była próba potwierdzenia hipotezy sformułowanej przez Blochowicza i współpracowników, że przyczyną różnic w widmach BDS i DDL jest różna czułość tych technik spektroskopowych na dwa typy korelacji pomiędzy polarnymi cząsteczkami – korelację-*self* i korelację-*cross*. Dr Koperwas przeprowadził symulacje komputerowe eksperymentu BDS dla dwóch układów z romboidalnymi molekułami różniącymi się momentami dipolowymi i wykazał, że dla układu z cząsteczkami o niskim momencie dipolowym funkcja korelacji całkowitego momentu dipolowego jest określona głównie przez korelację-*self*, natomiast dla układu bardziej polarnego rośnie wkład korelacji-*cross*. Jak wynika z podsumowania tej części rozprawy, dr Koperwas zdaje sobie jednak sprawę, że do pełnego potwierdzenia hipotezy Blochowicza należy jeszcze wykazać, że wyniki uzyskane z eksperymentu DDL są niewrażliwe na korelację-*cross*, co jest przedmiotem aktualnie prowadzonych przez niego badań. Takie krytyczne podejście do wyników własnych badań świadczy o dojrzałości dr. Koperwasa jako naukowca.

Przedstawione powyżej komentarze dotyczące wyników które uważam za najważniejsze i najciekawsze w recenzowanym cyklu publikacji należałoby porównać z opinią Habilitanta na temat wagi poszczególnych elementów jego osiągnięcia naukowego. Taką możliwość stworzyło przedstawiony w autoreferacie podrozdział *Podsumowanie* i rzeczywiście dr Koperwas w zwięzły sposób wymienia tam swoje główne osiągnięcia, ale większa część tego krótkiego podsumowania jest poświęcona wskazaniu, że w swoich badaniach nie uwzględnił wszystkich aspektów budowy cząsteczek, które mogą mieć wpływ na dynamikę molekularną. W konkluzjach zatem nie skupia się na podkreślaniu swoich osiągnięć, ale na sformułowaniu planów badawczych, co uważam za godne wyróżnienia.

Ocena całego dorobku naukowego

Pan Kajetan Koperwas ma w swoim dorobku naukowym 41 publikacji, co, biorąc pod uwagę że studia ukończył w roku 2011, bardzo dobrze świadczy o jego aktywności naukowej. Wiele z tych prac ukazało się w znakomitych czasopismach; sumaryczny Impact Factor tych artykułów wynosi 176,623, a indeks Hirscha dr. Koperwasa wynosi 12 (Scopus) lub 13 (Web of Science). Przegląd tematyki badawczej tych prac świadczy o zaangażowaniu się Habilitanta w wszechstronne badania procesów zeszklenia i krystalizacji, wykraczające poza tematykę rozprawy habilitacyjnej, a także o umiejętności pracy zespołowej. Aktualność i waga analizowanych problemów naukowych odzwierciedla się w wysokiej liczbie cytowań – ponad 350 bez autocytowań.

Dr Kajetan Koperwas swoje publikacje nie wchodzące w skład cyklu habilitacyjnego podzielił na trzy grupy. W pierwszej z nich, dedykowanej badaniom wpływu warunków termodynamicznych oraz ograniczenia przestrzennego na tempo procesu krystalizacji, są 4 publikacje. Wkład Habilitanta do tych prac polegał na obliczeniach teoretycznych i symulacji komputerowej dynamiki molekularnej i w mojej opinii był szczególnie istotny w przypadku pracy B3, bo pozwolił wyjaśnić rolę historii termicznej materiału w krystalizacji prowadzonej pod wysokim ciśnieniem.

Druga grupa prac, której Habilitant nadał tytuł „Wyjaśnienie pochodzenia wykładnika skalującego dla materiałów rzeczywistych”, liczy 8 pozycji. Prace te poświęcone były głównie weryfikacji uogólnionego równania stanu i badaniu skalowania gęstościowego i wyznaczaniu wykładników skalujących. Wkład dr. Koperwasa w powstanie tych publikacji jest także ważki, zarówno od strony merytorycznej, jak i organizacyjnej, bo pełnił rolę promotora pomocniczego doktoranta który był współautorem dwóch z tych publikacji.

Trzecia grupa publikacji, licząca 10 pozycji dotyczy różnorodnej tematyki, m.in. kinetyki polimeryzacji czy krystalizacji leków i dowodzi wszechstronnych zainteresowań dr. Koperwasa oraz jego otwartości na współpracę z różnymi zespołami badawczymi.

Dr Kajetan Koperwas wyniki swoich badań przedstawił w formie wykładów na 2 krajowych i 7 międzynarodowych konferencjach naukowych; zaprezentował także 4 plakaty na konferencjach międzynarodowych. Ta aktywność została w latach 2020-21 zahamowana przez pandemię, natomiast w tym okresie opublikował szereg prac w bardzo dobrych czasopismach. To zapewniło mu rozpoznawalność na forum międzynarodowym i w tym sensie skompensowało brak dłuższych staży zagranicznych. O pozycji naukowca w międzynarodowym środowisku naukowym świadczy także zlecenie mu recenzowania prac nadsyłanych do prestiżowych

czasopism naukowych. Dr Kajetan Koperwas zamieścił informację o trzech wykonanych recenzjach dla czasopism naukowych z listy JCR; zwracam jednak uwagę, że nie należało upubliczniać danych o recenzowanych publikacjach i ich autorach, bo są to informacje poufne.

Dr Kajetan Koperwas nie kierował żadnym projektem badawczym, co częściowo wynika z faktu, że przez większość okresu swojej pracy był zaangażowany w projektach kierowanych przez prof. dr. hab. Mariana Palucha. Niewątpliwie jako „post doc” i jeden z głównych wykonawców zdobył doświadczenie w organizowaniu pracy zespołowej i realizacji zadań badawczych, ale brak w dorobku kierowania projektem utrudni w przyszłości uzyskanie własnego grantu.

Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Dr Kajetan Koperwas w latach 2016 - 2019 pracował jako nauczyciel akademicki, najpierw jako asystent, a następnie jako adiunkt, więc zapewne zdobył doświadczenie w prowadzeniu zajęć audytoryjnych i laboratoryjnych dla studentów, ale w dostarczonych mi materiałach nie ma informacji na ten temat.

Natomiast do osiągnięć dydaktycznych dr. Koperwasa niewątpliwie należy zaliczyć różnorodną działalność popularyzującą naukę i czynny udział w kilku projektach mających na celu zapoznanie studentów i uczniów z metodami symulacji komputerowych i programowaniem robotów. Do osiągnięć dydaktycznych dr. Koperwasa w zakresie kształcenia młodej kadry naukowej należy zaliczyć opiekę naukową nad doktorantem w roli promotora pomocniczego.

Dr Kajetan Koperwas był członkiem komitetu organizacyjnego trzech dużych konferencji międzynarodowych organizowanych przez jego macierzystą jednostkę.

Wniosek końcowy

Z pełnym przekonaniem stwierdzam, że osiągnięcia naukowe dr. Kajetana Koperwasa, stanowiące podstawę wniosku o uzyskanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk fizycznych, odpowiadają wymaganiom określonym w art. 219 ust. 1 pkt 2, ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce*. Bardzo wysoko oceniam cały jego dorobek naukowy, co upoważnia mnie do skierowania wniosku do Komisji Habilitacyjnej o dopuszczenie dr. Kajetana Koperwasa do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Prof. dr hab. Jacek Ulański