

RECENZJA

dorobku naukowego, w tym rozprawy habilitacyjnej pt. „*Od struktury do właściwości cieczy jonowych – zastosowanie korelacji empirycznych i modeli termodynamicznych*” oraz dorobku dydaktycznego i organizacyjnego dr. inż. Kamila Paduszyńskiego w postępowaniu habilitacyjnym o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych w dyscyplinie chemia, prowadzonym przez Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej

I. Kryteria oceny

Stosownie do treści art. 16 ust. 1 *ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule naukowym w zakresie sztuki* (t.j. Dz. U. z 2017 r., poz. 1789) w zw. z art. 179 ust. 2 *ustawy z dnia 3 lipca 2018 r. Przepisy wprowadzające ustawę - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz.U. z 2018 r., poz. 1669), jak również przepisów *rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 19 stycznia 2018 r. w sprawie szczegółowego trybu i warunków przeprowadzania czynności w przewodzie doktorskim, w postępowaniu habilitacyjnym oraz w postępowaniu o nadanie tytułu profesora* (Dz. U. z 2018 r., poz. 261) przedmiotem i zakresem niniejszej opinii jest dokonanie oceny, czy dorobek naukowy, w tym rozprawa habilitacyjna, aktywność naukowa oraz inna działalność Habilitanta (np. organizacyjna czy dydaktyczna) może być uznana za spełniającą wymogi określone w wyżej zacytowanych przepisach, a mianowicie czy zaprezentowane w autoreferacie Habilitanta osiągnięcie naukowe stanowi znaczny wkład autora w rozwój określonej dyscypliny naukowej, a ponadto czy aktywność naukową Habilitanta można określić mianem istotnej.

W konsekwencji przedmiotem i zakresem opinii objęta zostanie w pierwszej kolejności ocena wartości wkładu w rozwój dyscypliny naukowej chemia powiązanego tematycznie cyklu publikacji zatytułowanego: „*Od struktury do właściwości cieczy jonowych – zastosowanie korelacji empirycznych i modeli termodynamicznych*” i oznaczonego przez dr. inż. Kamila Paduszyńskiego jako osiągnięcie naukowe, a w drugiej kolejności – aktywność naukowa, dydaktyczna i organizacyjna habilitanta.

II. Ocena wstępna

W ocenie recenzenta, dr inż. Kamil Paduszyński spełnia łącznie ustawowe przesłanki niezbędne do nadania stopnia doktora habilitowanego. Mianowicie, po zrealizowaniu pięcioletniego programu studiów w zaledwie cztery lata i obronie pracy dyplomowej zatytułowanej: *Właściwości termodynamiczne dwuskładnikowych mieszanin alkilofosfoniowych cieczy jonowych z rozpuszczalnikami organicznymi*, uzyskał w 2009 roku tytuł magistra inżyniera na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej z łączną oceną końcową na dyplomie: celującą. Warto odnotować, że praca magisterska – napisana pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Urszuli Domańskiej-Żelaznej – zaowocowała opublikowaniem trzech artykułów w periodykach naukowych z listy *Journal Citation Reports* (JCR).

Tak spektakularne zakończenie studiów magisterskich, przełożyło się bezpośrednio na podjęcie przez Habilitanta, również pod kierunkiem Profesor Domańskiej-Żelaznej, na macierzystej uczelni działalności naukowej a następnie uzyskaniem stopnia doktora nauk chemicznych. Został on nadany Habilitantowi uchwałą Rady Wydziału Chemicznego Politechniki Warszawskiej 5 listopada 2013 roku za pracę doktorską zatytułowaną: *Termodynamika cieczy jonowych badania eksperymentalne oraz nowe modele matematyczne*, przedstawioną w formie monotematycznego cyklu publikacji (9), opublikowanych w czasopismach z listy JCR. Rozprawa doktorska habilitanta została zauważona i w konsekwencji doceniona nagrodą Prezesa Rady Ministrów w 2015 roku.

W trakcie studiów doktoranckich habilitant został zatrudniony na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej, najpierw na stanowisku asystenta, a następnie – po obronie pracy doktorskiej – na stanowisku adiunkta.

Efektom działalności naukowej Habilitanta z okresu 2015 – 2019 są liczne, opublikowane w renomowanych czasopismach, prace naukowe oraz zauważalna aktywność naukowa w postaci udziału w konferencjach i realizacji wielu projektów badawczych. To wszystko przełożyło się na pełną rozpoznawalność dr. inż. Kamila Paduszyńskiego w środowisku krajowych i zagranicznych specjalistów z zakresu chemii fizycznej i termodynamiki chemicznej, zajmujących się tak badaniami eksperymentalnymi, jak i natury teoretycznej (np. modelowanie termodynamiczne).

Aktywność naukową Habilitanta cechuje konsekwencja i rzetelność. Prowadzi badania oddziaływujące na stan wiedzy z zakresu badań podstawowych, jak i aplikacyjnych, rozwijając przy tym metody i techniki badań teoretycznych (modelowanie termodynamiczne) z istotnym oddziaływaniem na projektowanie badań eksperymentalnych. Podejmowana tematyka badań dotyczy ważkich, współcześnie aktualnych zagadnień naukowych. W efekcie

przedmiot, zakres i sposób rozwiązywania postawionych tez badawczych, budzi powszechne zainteresowanie w środowisku naukowym. Naturalną konsekwencją tego jest opublikowanie prac naukowych dr. inż. Kamila Paduszyńskiego w prestiżowych periodykach o wysokim współczynniku oddziaływania oraz liczne ich cytowania. Dr. inż. Kamil Paduszyński wykazuje się też znaczącą aktywnością na zagranicznych konferencjach naukowych, na których wielokrotnie prezentował wyniki swych badań w formie zarówno posterów, jak również referatów. Wskazany zaś jako osiągnięcie naukowe jednotematyczny cykl publikacji zatytułowany: „*Od struktury do właściwości cieczy jonowych – zastosowanie korelacji empirycznych i modeli termodynamicznych*”, spełnia przesłankę znacznego wkładu habilitanta w rozwój dyscypliny chemia. Stanowi, bowiem udaną próbę gromadzenia obszernych zbiorów danych literaturowych o zbadanych eksperymentalnie układach, celem stworzenia relewantnych do postawionych tez badawczych dużych baz danych, które następnie znajdują zastosowanie do przeprowadzenia badań w zakresie wykorzystania istniejących metod modelowania termodynamicznego do przewidywania wyników badań eksperymentalnych, często równowag fazowych wieloskładnikowych układów czy projektowania molekularnego nowych klas specyficznych cieczy jonowych. Dodać należy, że Habilitant na tym nie poprzestał, podjął również udaną próbę badań w kierunku rozwijania znanych metod modelowania termodynamicznego w interesującym go obszarze badawczym, proponując nowe modele. Badania Habilitanta istotnie wpłyną na rozwinięcie funkcjonalności i możliwych zastosowań aplikacyjnych modeli: opartych o sieci neuronowe (ang. *Artificial Neural Network*, ANN) z wykorzystaniem algorytmów uczenia maszynowego, najnowocześniejszego równania stanu PC-SAFT oraz metod kwantowych COSMO-RS w modelowaniu termodynamicznym równowag fazowych w układach zawierających ciecze jonowe.

III. Uzasadnienie oceny rozprawy habilitacyjnej pt. „*Od struktury do właściwości cieczy jonowych – zastosowanie korelacji empirycznych i modeli termodynamicznych*”

1. Ocena współczynnika wpływu oddziaływania miejsca publikacji rozprawy habilitacyjnej

Artykuły, współtworzące powiązany tematycznie cykl publikacji, zostały opublikowane w czasopiśmie z listy JCR, renomowanych wydawnictw: *American Chemical*

Society, *Royal Society of Chemistry* oraz *Elsevier*. Cztery z nich stanowią prace monoautorskie, a cztery zostały przygotowane przez zespoły badawcze liczące od 2 do 4 autorów. W odniesieniu do wchodzących do cyklu prac wieloautorskich, nie zachodzą wątpliwości, że – plasujący się procentowo w wartościach od 60% do 95% (H1 – 95%, H3 i H4 – 60%, H8 – 90%) – wkład Habilitanta do ogłoszonych w nich wyników badań, odegrał wiodącą rolę w zakresie postawienia tezy badawczej, zaprojektowania i zrealizowania procesu badawczego wraz z krytyczną analizą całości pozyskanych wyników, a następnie – w opracowaniu artykułu naukowego oraz w wydawniczej procedurze recenzyjnej tych publikacji. Takie ustalenie potwierdza po pierwsze przyjęta (a zatem i zaakceptowana) przez zespół badawczy atrybucja autorstwa wieloautorskich prac włączonych do cyklu. Habilitantowi przypisano, bowiem status tak autora pierwszego, jak również autora korespondencyjnego każdej z tych prac. Poza powyższym kluczową rolę Habilitanta w procesie badawczym, a następnie powstaniu poszczególnych publikacji, wykazuje opisany w autoreferacie przedmiot i charakter Jego wkładu do każdej prac, który został potwierdzony załączonymi do przedmiotowego wniosku o wszczęcie postępowania habilitacyjnego oświadczeniami współautorów publikacji.

Każda z prac wchodzących do cyklu charakteryzuje się znaczącym wpływem oddziaływania z uwagi na prestiżowe miejsce publikacji oraz – w przypadku niektórych z nich – istotną liczbę cytowań. Mianowicie prace legitymuje następująca cytowalność: H1 – 66, a łącznie z autocytowaniami 73, H2 – 5, a łącznie z autocytowaniami 12, H3 – 11, a łącznie z autocytowaniami 12, H6 – 10, a łącznie z autocytowaniami 16, H7 – 1, a z autocytowaniami 4. Prace H4, H5 i H8 nie były jeszcze cytowane. Jeśli chodzi o prestiż miejsca publikacji, to prezentuje się to zagadnienie w parametrach scjentometrycznych w następujący sposób:

- H1, H2 zostały opublikowane w *Journal of Chemical Information and Modeling*, charakteryzowanym przez IF (2018) 3,82, 40 punktów w punktacji czasopism MNiSW na liście A oraz Q1 dla kategorii chemia,
- H3 została opublikowana w *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, charakteryzowanym przez IF (2018) 6,59, 40 punktów w punktacji czasopism MNiSW na liście A oraz Q1 dla kategorii chemia,
- H4 i H8 zostały opublikowane w *Journal of Molecular Liquids*, charakteryzowanym przez IF (2018) 4,33, 30 punktów w punktacji czasopism MNiSW na liście A oraz Q2 dla kategorii chemia fizyczna,

- H5 została opublikowana w *Industrial & Engineering Chemistry Research*, charakteryzowanym przez IF (2018) 3,33, 35 punktów w punktacji czasopism MNiSW na liście A oraz Q2 dla kategorii inżynieria chemiczna,
- H6 została opublikowana w *Physical Chemistry Chemical Physics*, charakteryzowanym przez IF (2018) 3,47, 40 punktów w punktacji czasopism MNiSW na liście A oraz Q2 dla kategorii chemia fizyczna,
- H7 została opublikowana w *Journal of Physical Chemistry B*, charakteryzowanym przez IF (2018) 2,88, 30 punktów w punktacji czasopism MNiSW na liście A oraz Q2 dla kategorii chemia fizyczna.

W efekcie sumaryczny IF (2018) dla cyklu publikacji wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej według listy JCR wynosi 32,57, a łączna liczba ich niezależnych cytowań (wg Scopus, stan na 8 kwietnia 2019 r.) – 93. Uwypuklić należy, że opiniowane prace naukowe były już cytowane, pomimo stosunkowo krótkiego okresu funkcjonowania w obiegu naukowym („najstarsze” dwie prace w cyklu opublikowane zostały w roku 2014 i 2016, natomiast większość z nich w okresie 2017 – 2019) oraz pomimo jednak niskowego charakteru problematyki badawczej, będącej obiektem dociekań naukowych Habilitanta. Grono naukowców zajmujących się taką problematyką na świecie jest – jeśli porównać do innych obszarów badawczych z zakresu nauk ścisłych – stosunkowo wąskie.

Wskazane okoliczności odgrywają istotną rolę dla sformułowania jednoznacznie pozytywnej oceny wpływu oddziaływania opiniowanej rozprawy habilitacyjnej.

2. Przedmiot badań rozprawy habilitacyjnej i ich merytoryczna ocena

Obiektem badań Habilitanta są ciecze jonowe. Geneza badań nad tymi związkami sięga wieku XIX, kiedy to otrzymano i po raz pierwszy opisano w literaturze, określane wówczas mianem „niskotopliwych soli organicznych” czy „stopionych soli”, związki chemiczne o cechach dzisiaj projektowanych i syntezowanych cieczy jonowych [S. Gabriel, J. Weiner, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.*, 21, 2669-2679 (1888) i P. Walden, *Bull. Russian Acad. Sci.*, 8, 405-422 (1914)]. Prawdziwa „kariera” przywołaną klasę związków czekała jednak dopiero od przełomu XX i XXI wieku, kiedy to doceniono ich cechę szczególną, a mianowicie możliwość modyfikowania budowy ze skutkiem projektowalności różnych ich funkcji [K. Seddon, *Molten Salt Forum: Proceedings of 5th International Conference*

on Molten Salt Chemistry and Technology (ed. H. Wendt) *Trans Tech Publications Zürich*, 5, 53 (1998)].

Aktualnie ciecz jonowa jest definiowana jako związek chemiczny zbudowany z kationu i anionu o temperaturze topnienia poniżej 100°C z jednoczesną możliwością występowania w stanie ciekłym nawet w temperaturze pokojowej, wykazujący cechę projektowalności z uwagi na możliwość wprowadzenia do współtworzących go jonów unikalnej właściwości lub funkcji [R.D. Rogers, K.R. Seddon, *Science*, 302, 792-793 (2003); P. Wasserscheid, T. Welton, *Ionic Liquids in Synthesis*, Wiley-VCH, Weinheim (2008)]. Taka budowa omawianego związku wpływa na jego daleko idącą różnorodność właściwości fizykochemicznych. Mogą je bowiem cechować: nielotny charakter, niepalność, odporność termiczna w szerokim zakresie temperatur, wysoka polarność, wysoka stabilność termiczna, szerokie okno elektrochemiczne, amfifilowość, właściwość powierzchniowa oraz międzyfazowa, a ponadto zdolność do rozpuszczania związków nieorganicznych czy organicznych, a także niektórych polimerów. W konsekwencji istnieje możliwość takiego zaprojektowania struktury interesującego nas związku, by wykazywał on pożądane właściwości fizyczne i chemiczne. Niemniej w literaturze podaje się, że dopuszczalne konfiguracje budowy cieczy jonowych mogą przełożyć się na otrzymanie nawet miliona różnych ich rodzajów, a w przypadku trójskładnikowych mieszanin cieczy jonowych – nawet 10^{18} [R.D. Rogers, *Nature* 447, 917-918 (2007), J.D. Holbrey, K.R. Seddon, *Clean Prod. Proc.*, 1, 223-236 (1999)].

Oczywiście wiodącą rolę przy ustalaniu właściwości fizykochemicznych (gęstości i lepkości w funkcji temperatury i/lub ciśnienia) oraz termodynamicznych (dane kalorymetryczne jak: temperatury oraz entalpie przemian fazowych, pojemność cieplna), a także stężeniowe zależności funkcji termodynamicznych układów opartych o ciecze jonowe, a w konsekwencji w weryfikowaniu czy zsyntezowana ciecz jonowa wykazuje oczekiwane cechy, nadal odgrywa tradycyjny eksperyment. Niemniej nieograniczony niemal potencjał w projektowaniu nowych kategorii cieczy jonowych (posiadających już przecież trzy generacje), rodzi potrzebę tworzenia i weryfikowania metod obliczeniowych, które na etapie projektowania budowy cieczy jonowej, na podstawie dostępnych danych literaturowych, pozwolą przewidzieć jej właściwości fizykochemiczne, charakterystykę termodynamiczną oraz w dalszej kolejności równowagi fazowe układów opartych o tę ciecz. Innymi słowy interesujące nas badania teoretyczne mają służyć temu, by zsyntezowany materiał posiadał pożądane cechy w zakresie jego właściwości fizykochemicznych czy termodynamicznych.

To ostatnie, niezwykle doniosłe zagadnienie badawcze, stało się przedmiotem dociekań naukowych Habilitanta, a ich wyniki zaprezentowano w rozprawie habilitacyjnej. Ideą przewodnią badań Habilitanta, zarazem uzasadniająca zakwalifikowanie prac H1 – H8 jako cyklu publikacji tematycznie powiązanych, stało się opracowanie i/lub zbadanie trzech zasadniczych grup narzędzi obliczeniowych, a mianowicie metody sztucznych sieci neuronowych (ANN) z wykorzystaniem klasycznej idei udziałów grupowych (ang. *group contribution*, GC) i tzw. metody uczenia maszynowego (ang. *machine learning*) w pracach H1–H4, termodynamicznego równania stanu PC-SAFT w pracy H5 oraz podejścia kwantowo-mechanicznego COSMO-RS w pracach H6 – H8, do projektowania struktury cieczy jonowej tak, aby wykazywała ona po jej otrzymaniu pożądaną charakterystykę. Temu ostatniemu celowi miało zaś służyć odpowiednie zaprojektowanie samej struktury chemicznej kationu i anionu, jonów tworzących ciecz. Z zastosowaniem proponowanych w rozprawie habilitacyjnej podejść i metod modelowania termodynamicznego, wysiłki Habilitanta powinny przełożyć się na możliwość przewidywania co najmniej prostych właściwości fizykochemicznych czystych związków, a w przyszłości na projektowanie cieczy jonowych i układów złożonych z tychże cieczy o różnych funkcjach i zastosowaniach.

Reasumując efekty badań Habilitanta, w kolejnych pracach, wchodzących w skład cyklu, zbadane zostały następujące kwestie:

- w H1 i H2 z wykorzystaniem klasycznej idei udziałów grupowych (GC), zakładającej kwalifikowanie struktury cząsteczki jako sumy mniejszych fragmentów, powtarzających się systematycznie w wielu związkach, podjęto – w oparciu o dane literaturowe zweryfikowane eksperymentalnie – udane próby przewidzenia (wymodelowania) charakterystyki cieczy jonowej za pomocą zaproponowanych dwóch nowych bardzo rozbudowanych korelacji; w pracy H1 dotyczyło to parametru, jakim jest lepkość cieczy jonowej, a w H2 – granicznych współczynników aktywności wybranych związków chemicznych w cieczach jonowych.

W obu pracach Habilitant przedstawia nowe modele; owe rozbudowane korelacje do modelowania właściwości cieczy jonowej stanowią modele jakościowo nowe; w przypadku pracy H2 model został stworzony w oparciu o trzy algorytmy tzw. metody uczenia maszynowego (ang. *machine learning*), zaś model zaprezentowany w pracy H1 oceniać należy jako unikatowy, ponieważ jako jeden z niewielu w literaturze przedmiotu uwzględnia ciśnieniową zależność lepkości cieczy jonowych. Warto odnotować, że na potrzeby powstania pracy H1 i weryfikacji skonstruowanego nowego modelu, Habilitant – na podstawie opublikowanych danych

eksperymentalnych z lat 1984 – 2014 – stworzył bazę danych, obejmującą w sumie aż 1500 cieczy jonowych i 450 artykułów.

Chcąc wejść w dyskusję z Habilitantem należy zwrócić uwagę, że celem modelowania temperaturowo-ciśnieniowej zależności lepkości cieczy jonowych, użył nieliniowego modelu opartego o 242 molekularne deskryptory bez ich optymalizacji. Stosowanie tak rozbudowanych modeli nieliniowych generuje wzajemne skorelowanie deskryptorów, skutkując powstaniem kłopotliwej osobliwości macierzy x . Tymczasem prosty model liniowy, oparty o częściowe najmniejsze kwadraty, powinien wyeliminować problem osobliwości macierzy. Wydaje się, że Habilitant mógłby rozważyć prowadzenie dalszych badań w tym kierunku, upraszając zaproponowany przez siebie model, jak również model ten rozwijać i uaktualniać, weryfikując jego zastosowania do nowych danych, które pojawiły się w literaturze po dacie opublikowania tych prac.

Niemniej ocenić należy, że obie prace stanowią znaczny wkład w stan wiedzy o projektowaniu cieczy jonowych.

- w H3 i H4 wykazano, że metody oparte na dobrze znanej idei udziałów grupowych (GC), pozwalają na zaprojektowanie struktury cieczy jonowej do zastosowań w procesach ekstrakcji. Habilitant przeanalizował i zgromadził znaczną ilość eksperymentalnych danych literaturowych, a następnie stworzył dużą bazę danych, aby dokonać odpowiedniego doboru kategorii cieczy jonowych do oddzielenia tiofenu i *n*-heptanu.

Chcąc znów wejść w dyskusję z Habilitantem uwypuklić należy, że w pracy H3 nie zdecydował się na modelowanie nowych, nieznanych do tej pory cieczy jonowych, celem podjęcia próby ich zsyntezowania i użycia do analizowanego w pracy procesu ekstrakcji. Tymczasem byłby to bardzo ciekawy i nowatorski a zarazem komplementarny projekt badawczy, wykazujący bezsprzeczną słuszność tez badawczych Habilitanta. Zapewne o niepodjęciu tego trudu zadecydowały względy ekonomiczne, bowiem synteza cieczy jonowych w wymiernej ilości jest niezmiernie kosztowna.

Niemniej, oceniając obie prace, należy uwypuklić, iż stanowią one bardzo wysokiej jakości praktyczny wkład do rozwoju inżynierii chemicznej.

- w H5 w odniesieniu do modelowania diagramów fazowych równowag ciecz-ciecz analizowano funkcjonalność i efektywność równania stanu PC-SAFT, które należy do rodziny najbardziej rozbudowanych i nowoczesnych równań stanu.

Analizując tę pracę odnotować należy, że Habilitant wykazał się w niej nowatorskim podejściem. Mianowicie, chcąc uzyskać parametry równania stanu PC-SAFT, wykorzystał do tego celu parametr rozpuszczalności Hildebranda. Jednocześnie na tym tle nasuwa się pytanie, którego zasadność postawienia zresztą zauważył sam Habilitant. Otóż, czy stosowanie danych odnoszących się do mieszanin w celu parametryzacji równania stanu PC-SAFT oraz z zamiarem opisu tychże mieszanin, nie jest „zaprzeczeniem” predykcyjności tego równania?

Odnosząc się do zastosowania w pracy modelu UNIFAC do wyznaczenia nadmiarowej entalpii swobodnej, a w dalszej kolejności poprawki binarnej w modelu PC-SAFT, podkreślić należy, że jest to bardzo dobre i efektywne rozwiązanie, ponieważ warunkuje ograniczenie znajomości danych doświadczalnych niezbędnych do parametryzacji równania stanu PC-SAFT.

Docenić należy, że Habilitant celem modelowania równowag fazowych zebrał z literatury ponad 900 diagramów fazowych. Wydaje się, że aby mógł tego dokonać tak efektywnie i dodatkowo w tak krótkim czasie, musiał opracować własną metodą pobierania danych z opublikowanych artykułów i przenoszenia ich do tworzonej przez siebie bazy danych. W innym razie podjęte wysiłki należałoby oceniać jako nieefektywne i zbyt czasochłonne w stosunku do nakładu pracy włożonego w same modelowanie termodynamiczne.

Reasumując oceniana praca, prezentując obliczenia złożonych równowag fazowych układów wieloskładnikowych z wykorzystaniem modelu PC-SAFT, stanowi istotny, wysokiej jakości wkład w stan wiedzy.

- w H6–H8 przedmiotem badań była ocena dokładności wyników modelowania kwantowo-mechanicznego, uzyskiwanego metodą COSMO-RS (a zatem zamkniętego komercyjnego oprogramowania), z perspektywy ich użyteczności w projektowaniu nowych związków. Jednocześnie tą drogą weryfikowano możliwości i efektywność metody COSMO-RS do przewidywania granicznych współczynników aktywności w cieczach jonowych oraz diagramów fazowych równowagi ciecz-ciecz w układach trójskładnikowych z cieczami jonowymi. Jest to obszar badawczy, który dotąd nie był objęty zakresem szerokich i wnikliwych analiz i opracowań.

Przechodząc do szczegółów, w H7 wykazano, że wydajność tego modelu jest silnie uzależniona od typu obu cieczy jonowych w układzie ciecz – ciecz; zaś w H8 próbowano zweryfikować efektywność podejścia COSMO-RS w odtwarzaniu jakościowego wpływu struktury chemicznej cieczy jonowej na równowagę ciecz –

ciecz w procesach wydzielania 2-fenyletanolu z roztworów wodnych. W efekcie ustalono, że metoda COSMO-RS tylko częściowo odtwarza wskazane stosunki. W konsekwencji należy przyjąć, że praca H8 nie zawiera niezawodnej odpowiedzi na postawioną tezę badawczą, ale prezentuje pewne założenia, wymagające dalszych prac.

W analizowanych pracach Habilitant słusznie potwierdza, że równowagi fazowe układów z asocjacją są lepiej przewidywane przez COSMO-RS niż te, gdzie typowa asocjacja, tj. poprzez wiązania wodorowe, nie występuje (np. mieszaniny węglowodorów). Wydaje się, że obserwacje te mają swoje podwaliny w samej metodzie COSMO-RS. Mianowicie im bardziej dobitna jest reprezentacja rozkładu ładunku (sigma profile) cząsteczki, tym bardziej wiarygodna jest metoda COSMO-RS. W przypadku cząsteczek węglowodorów alifatycznych, gdzie mamy do czynienia z „ładunkiem obojętnym”, ich sigma profile są słabe, co przekłada się na obliczany potencjał chemiczny, a w konsekwencji na przewidywane równowagi fazowe.

Reasumując powyższe przyjąć należy, że każda z omawianych prac H6–H8 podejmuje niezmiernie istotne zagadnienie naukowe i wypełnia lukę w stanie wiedzy, zachęcając do dalszych badań. Prace te stanowią zatem znaczący wkład w rozwój dyscypliny chemia.

3. Konkluzja

Składające się na cykl habilitacyjny prace badawcze stanowią znaczący wkład Habilitanta w rozwój dyscypliny chemia w zakresie tworzenia baz danych charakteryzujących cieczki jonowe o znanej strukturze oraz weryfikowania przydatności danych eksperymentalnych w modelowaniu termodynamicznym do przewidywania charakterystyki fizykochemicznej i termodynamicznej cieczy jonowych oraz tworzenia nowych podejść poprzez rozwijanie istniejących modeli i zaproponowanie własnych, jakościowo nowych ich opracowań aspirujących do statusu nowych modeli. Bezsporną wartością ocenianej rozprawy habilitacyjnej jest wykazanie komplementarności podejścia eksperymentalnego a modelowanie termodynamiczne, a ponadto udowodnienie, że trzy najbardziej aktualne narzędzia obliczeniowe chemii fizycznej jak: korelacje struktura – właściwości (wsparte o sieci neuronowe), równania stanu z rodziny SAFT oraz metody kwantowe COSMO-RS, stanowią podstawę nowoczesnego modelowania termodynamicznego ciekłych układów.

IV. Ocena dorobku naukowego – publikacji niewchodzących w skład jednotematycznego cyklu publikacji, opublikowanych po nadaniu stopnia doktora

Przedmiotem niniejszej opinii jest dorobek naukowy niewchodzący w skład jednotematycznego cyklu publikacji, powstały po nadaniu stopnia doktora, a zatem aktywność publikacyjna, jak i konferencyjna Habilitanta z okresu 2013 – IV.2019.

We wskazanym okresie Habilitant opublikował, jako monoautorskie lub wieloautorskie prace, łącznie dwadzieścia sześć artykułów, w tym osiem składających się na rozprawę habilitacyjną, w prestiżowych periodykach naukowych takich, jak czasopisma z dziedziny chemii fizycznej, w tym obliczeniowej: *Journal of Physical Chemistry*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, *Journal of Molecular Liquids*, *Journal of Chemical Information & Modeling* oraz termodynamiki chemicznej roztworów: *Journal of Chemical Thermodynamics*, *Fluid Phase Equilibria*. Wiodącym tematem badawczym Habilitanta są ciecze jonowe, postrzegane jako nowoczesne rozpuszczalniki „zielonej” chemii. W publikacjach analizuje się przede wszystkim termodynamiczne właściwości cieczy jonowych w oparciu o ich międzycząsteczkowe oddziaływania z „klasycznymi” rozpuszczalnikami. Poruszone zagadnienia nawiązują do problemów praktycznych, w tym do zastosowań cieczy jonowych w procesach rozdzielania mieszanin ciekłych metodą ekstrakcji w układzie ciecz-ciecz (np. ekstrakcyjne odsiarczanie paliw, separacja alkoholi z roztworów wodnych). W analizowanych pracach łączy się badania eksperymentalne oraz modelowanie termodynamiczne przy użyciu zaawansowanych narzędzi współczesnej termodynamiki chemicznej, np. równanie stanu PC-SAFT czy też podejście z użyciem metod kwantowych COSMO-RS. W większości ocenianych wieloautorskich pozycji Habilitant posiada status autora albo pierwszego albo korespondencyjnego. Taka atrybucja autorstwa – na gruncie obowiązujących w nauce zasad oceny wkładu w badania i w powstanie publikacji – pozwala przyjąć, że udział Habilitanta w postawieniu tezy badawczej, przeprowadzeniu badań oraz wyprowadzeniu na ich podstawie analiz i konkluzji, był nie tylko istotny i twórczy, ale także przeważający w stosunku do pozostałych współautorów. Już te okoliczności pozwalają uznać dorobek Habilitanta za znaczący, jednocześnie jego ocena podlegać musi znacznemu podwyższeniu, gdy uwzględnimy, że aktywność naukowa Habilitanta, wyrażająca się w opublikowaniu łącznie, w tym w okresie przeddoktorskim pięćdziesięciu jeden prac, przełożyła się na bardzo wysokie dane scjentometryczne. Mianowicie jego sumaryczny IF (2017) wynosi 87,036, a łączna liczba cytowań (wg Scopus, stan na 08.04.2019) wynosi 205, a po uwzględnieniu autocytowań 264. W konsekwencji dorobek naukowy Habilitanta

legitymuje się indeksem Hirscha H o wartości 17 (bez autocytowań), co stanowi dla dyscypliny chemia poziom dobry, lecz gdy weźmiemy pod uwagę młody wiek i specyfikę zakresu badawczego (niszowość z uwagi na stosunkowo niewielką liczbę naukowców na świecie publikującej z tej problematyki), jest to wynik bardzo dobry. Habilitant wziął udział w 33 międzynarodowych konferencjach, na których przedstawił łącznie 10 referatów oraz zaprezentował 23 postery. Habilitant brał udział ze statusem kierownika lub wykonawcy w realizacji dziesięciu projektów badawczych, finansowanych ze źródeł zewnętrznych NCN i MNiSW. Uszczegóławiając Habilitant kierował trzema projektami, a mianowicie finansowanych z konkursów: „Preludium” NCN pt. *„Ciecze jonowe jako nowoczesne i ekologiczne rozpuszczalniki cukrów”* (lata 2012–2015), Iuventus Plus MNiSW pt. *„Projektowanie struktury cieczy jonowych metodami „in silico” – nowe korelacje i równania stanu oparte na idei udziałów grupowych, metoda COSMO-RS”* (lata 2014–2016), „Sonata” NCN pt. *„Wspomagane komputerowo projektowanie cieczy jonowych nowymi modelami QSPR uwzględniającymi różne wymiarowości reprezentacji chemicznej jonów”* (lata 2017–2020). Pokłosiem tych dwóch ostatnich projektów stała się opiniowana rozprawa habilitacyjna.

Warto odnotować, że habilitant za swoje osiągnięcia naukowe otrzymał liczne nagrody i wyróżnienia, w tym dwukrotnie prestiżowe stypendium START Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej, nagrody Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego czy JM Rektora Politechniki Warszawskiej.

Słabym punktem aktywności naukowej Habilitanta, jest brak stażu naukowego na stanowisku post-doc lub choćby krótkoterminowego pobytu z programu NAWA w innej jednostce naukowej, a zwłaszcza zagranicznej. Ten brak w opiniowanym dorobku przełożył się na grono współpracowników, z którymi Habilitant współtworzy zespoły badawcze. Mają one charakter wyłącznie krajowy czy wręcz lokalny (są tworzone w ramach macierzystej jednostki naukowej). Wydaje się, że Habilitant mógłby rozważyć w przyszłości, choć krótki staż w zagranicznej jednostce naukowej, niewątpliwie takie wyjazdy rozszerzają horyzonty i mogą owocować ciekawymi projektami badawczymi. Niezależnie od dostrzeżonego niedostatku aktywności naukowej Habilitanta, podkreślić należy, że nie przełożył się on na obniżenie jakości i wartość podejmowanych przezeń projektów badawczych. Plasują się one na wysokim światowym poziomie, czego dowodem jest znaczna tak cytowalność prac Habilitanta, jak i Jego aktywność konferencyjna, a także udział w licznych, w tym w trzech ze statusem kierownika, projektach badawczych finansowanych z grantów pozyskanych w prestiżowych konkursach finansowanych ze źródeł zewnętrznych NCN i MNiSW.

Reasumując dorobek naukowy, jak również aktywność naukową Habilitanta, należy ocenić jednoznacznie pozytywnie, dodając że – z uwzględnieniem młodego wieku Habilitanta – powinny być oceniane jako wręcz znakomite i ponadprzeciętne.

V. Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej oraz w zakresie współpracy międzynarodowej

Habilitant wykazuje się aktywną działalnością dydaktyczną. W macierzystej jednostce prowadził wykłady i ćwiczenia audytoryjne, laboratoria, wykłady i laboratoria komputerowe. Był promotorem dwóch prac inżynierskich oraz jednej pracy magisterskiej.

Habilitant jest recenzentem w takich czasopismach, jak: *Journal of Molecular Liquids* (Elsevier), *Journal of Chemical Thermodynamics* (Elsevier), *Fluid Phase Equilibria* (Elsevier), *Journal of Chemical & Engineering Data* (ACS), *Industrial & Engineering Chemistry and Research* (ACS), *Journal of Physical Chemistry B* (ACS). Jest członkiem „Editorial Advisory Board” czasopisma *Journal of Chemical & Engineering* (na lata 2015 – 2016, 2018 – 2020).

Habilitant nie wykazał w dokumentacji habilitacyjnej jakiegokolwiek działalności organizacyjnej czy popularyzatorskiej, aczkolwiek tego rodzaju aktywności mają marginalne znaczenie przy opiniowaniu dorobku naukowca ubiegającego się stopień doktora habilitowanego. Ten niedostatek aktywności Habilitanta, nie może mieć większego znaczenia i w efekcie zaopiniować należy Jego poza badawczą aktywność jednoznacznie pozytywnie.

VI. Konkluzja

Wobec dokonanych ustaleń stwierdzam, że rozprawa habilitacyjna dr. inż. Kamila Padaszyńskiego, ogłoszona w formie jednotematycznego cyklu publikacji pt. „*Od struktury do właściwości cieczy jonowych – zastosowanie korelacji empirycznych i modeli termodynamicznych*”, wskazana jako główne osiągnięcie naukowe uzyskane po nadaniu stopnia doktora, z powodzeniem może być uznana za znaczny wkład w rozwój nauk chemicznych w dyscyplinie chemia. Dowodzi ono dużego zaangażowania badawczego oraz samodzielności intelektualnej dr. inż. Kamila Padaszyńskiego. Habilitant wykazuje bowiem zdolność do samodzielnego stawiania problemów badawczych, nieodbiegających od światowych trendów w termodynamice chemicznej, a następnie ich efektywnego rozwiązywania z wykorzystaniem najbardziej skomplikowanych i zaawansowanych narzędzi matematycznych.

Habilitant wykazuje się również istotną aktywnością naukową w odniesieniu tak, do jakości przedłożonych prac i zasięgu czasopism, w których zostały opublikowane, jak również aktywności na międzynarodowych konferencjach czy w udziale w realizacji projektów badawczych, finansowanych z grantów pozyskanych w prestiżowych konkursach NCN, FNP czy MNiSW. O jakości dorobku naukowego dr. inż. Kamila Paduszyńskiego świadczą zwłaszcza wysokie wartości parametrów scjentometrycznych (indeks Hirscha – 17), potwierdzających znaczącą aktywność naukową dr. inż. Kamila Paduszyńskiego w objętych opinią latach 2013 – IV.2019.

Powyższe pozwala stwierdzić, że dr inż. Kamil Paduszyński spełnił przywołane na wstępie ustawowe wymagania stawiane w postępowaniu habilitacyjnym. W efekcie stoję na stanowisku, że Habilitant powinien zostać dopuszczony do dalszego procedowania w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych w dyscyplinie chemia.

Mirosław Chorążewski

.....
/Mirosław Chorążewski/