



Wrocław, 4 maja 2023 roku

Dr hab. inż. Robert W. Góra, prof. uczelni
Instytut Materiałów Zaawansowanych
Wydział Chemiczny
Politechnika Wrocławska
e-mail: robert.gora@pwr.edu.pl
tel. +48 71 320 4472

Recenzja osiągnięć naukowych
dr. Przemysława Damiana DOPIERALSKIEGO
w związku z Jego wnioskiem o przeprowadzenie postępowania w sprawie
nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i
przyrodniczych w dyscyplinie nauk chemicznych

Stosownie do art. 221 ust. 8 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (dalej p.s.w.n.) recenzenci powołani w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego zobowiązani są ocenić, czy osiągnięcia naukowe osoby ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego odpowiadają wymaganiom określonym w art. 219 ust. 1 pkt 2. teŹe.

Mając na uwadze powyŹsze, oceniając wniosek pod wzgłędem formalnym naleŹy stwierdzić, Źe Wnioskodawca przedstawił do oceny osiągnięcie naukowe zatytułowane *Mechanochemia obliczeniowa – od implementacji do zrozumienia reaktywności indukowanej zewnętrzną siłą rozciągającą dla wybranych ścieŹek reakcji* w formie **cyklu ośmiu powiązanych tematycznie artykułůw naukowych**. Co istotne wszystkie te artykuły opublikowane zostały w czasopismach naukowych, które w roku opublikowania w ostatecznej formie **były ujęte** w określonych w ustawie p.s.w.n. bądź przepisach ją wprowadzających wykazach. Tytułem wyjaśnienia naleŹy dodać, Źe opis rzeczonych artykułůw w autoreferacie a w szczególności podana tam przypisana im punktacja oznaczona akronimem MNiSW odnosi się do aktualnego wykazu podczas gdy większość, bo aŹ siedem z ośmiu artykułůw ukazało się przed 1 stycznia 2019 r. – zatem właściwym wykazem w przypadku tych artykułůw jest ten określony komunikatem MNiSW z dnia 25 stycznia 2017 r. Niemniej jednak, naleŹy stwierdzić, Źe artykuły te ukazały się w czasopismach naukowych, które zostały ujęte w części A wspomnianego wykazu.

Podstawowym obowiązkiem recenzenta w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego jest ocena czy Kandydat posiada w swoim dorobku osiągnięcia naukowe stanowiące znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny. Po zapoznaniu się z wnioskiem wraz z załącznikami oraz dorobkiem naukowym Kandydata mogę jednoznacznie stwierdzić, iż w mojej ocenie **spełnia on wszelkie formalne i zwyczajowe wymagania warunkujące nadanie stopnia doktora habilitowanego**. Aby uzasadnić swój wniosek pozwolę sobie przedstawić krótką charakterystykę zainteresowań naukowych dr. Dopieralskiego i jego najważniejszych osiągnięć naukowych.

Sylwetka naukowa Kandydata.

Dr Przemysław Dopieralski uzyskał stopień doktora nauk chemicznych w zakresie chemii fizycznej i teoretycznej uchwałą Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego dnia 23 września 2008 r. W swojej rozprawie doktorskiej, zrealizowanej pod opieką prof. Zdzisława Latajki, przedstawił wyniki badań metodami chemii obliczeniowej nad przeskokiem protonów kwasach karboksylowych uzyskane przy wykorzystaniu metody dynamiki molekularnej *ab initio* w formalizmie Cara-Parrinello (dalej CPMD). Metodologia ta stała się ważnym elementem warsztatu badawczego Kandydata w jego późniejszych pracach nad rozwojem metodologii obliczeniowej dedykowanej do badań mechanochemii. Również zagadnienia badawcze związane z dynamiką przeniesienia protonów w układach molekularnych przy wykorzystaniu metod symulacji z pierwszych zasad podejmowane były przez Habilitanta w trakcie jego dalszej kariery naukowej.

Po obronie doktoratu w 2008 roku Habilitant uzyskał zatrudnienie na Wydziale Chemii macierzystej uczelni, początkowo na stanowisku asystenta a od 2010 roku adiunkta. W latach 2009-2013 odbył dwa długoterminowe staże podoktorskie o łącznej długości ponad 4,5 roku w zespole prof. Dominika Marxa na Uniwersytecie Ruhry w Bochum. To właśnie w trakcie tych staży naukowych powstały pierwsze artykuły z cyklu wskazanego jako jedno z osiągnięć naukowych wymaganych w art. 219 ust. 1 pkt. 2 lit. b ustawy p.s.w.n. Staż ten niewątpliwie ukształtował Kandydata zarówno pod względem podejmowanej tematyki badawczej jak i warsztatu badawczego. To właśnie w tym okresie Habilitant rozpoczął swoje badania nad teoretycznymi zagadnieniami mechanochemii. Również w ramach współpracy z prof. Marxem ukazały się artykuły Habilitanta w najbardziej prestiżowych periodykach w tym w szczególności dwa artykuły w *Nature Chemistry* i trzy w *Angewandte Chemie-International Edition*. Wnioskując z afiliacji artykułów naukowych Habilitanta współpraca ta jest wciąż kontynuowana.

W latach 2015-2025 dr Dopieralski **kierował bądź wciąż kieruje trzema projektami badawczymi**, które uzyskały finansowanie w ramach konkursu OPUS Narodowego Centrum Nauki. Dwa z nich dotyczyły badań z zakresu mechanochemii obliczeniowej a jeden rozszerzalności temperaturowej kryształów zawierających odmienne izotopy wodoru w kontekście określenia ich efektywnego rozmiaru. W mojej ocenie to bardzo ważny element dorobku naukowego Kandydata demonstrujący z jednej strony jego dojrzałość i samodzielność naukową, z drugiej zaś skuteczność w pozyskiwaniu środków na badania naukowe dowodzi

wysokiej oceny środowiska naukowego dla podejmowanej przez Habilitanta tematyki badawczej i jego dorobku naukowego. Szkoda, że w tym zestawieniu zabrakło grantów na rozwój zespołów badawczych jak *First Team* Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej czy SONATA BIS Narodowego Centrum Nauki – sądzę, że pozwoliłyby one zbudować Kandydatowi własny zespół badawczy wokół realizowanej przez Niego bardzo ciekawej i unikatowej w skali kraju tematyki.

Choć niewątpliwie najważniejsze osiągnięcia naukowe Habilitanta to te bezpośrednio dotyczące mechanochemii obliczeniowej jest on współautorem łącznie 27 artykułów naukowych jakie ukazały się w recenzowanych czasopismach o obiegu międzynarodowym oraz czterech rozdziałów w monografiach opublikowanych przez renomowane wydawnictwa. Artykuły te były zgodnie z informacjami zawartymi we wniosku **cytowane niezależnie 333 razy** a 10 z nich cytowanych było częściej niż 10 razy (tzw. indeks Hirsha). W zdecydowanej większości artykuły te ukazały się już po obronie doktoratu (tylko jeden artykuł był opublikowany wcześniej). Oprócz wspomnianych już zagadnień dotyczących mechanochemii obliczeniowej i dynamiki przeniesienia protonu Habilitant podejmował w swoich badaniach bardzo różne wątki począwszy od liniowych i nieliniowych właściwości elektrooptycznych kompleksów molekularnych połączonych wiązaniami wodorowymi, przez aromatyczność układów pierścieniowych, po naturę wiązań chalkogenowych i właściwości układów krystalicznych – co dowodzi Jego szerokich horyzontów naukowych.

Warto nadmienić, że za rezultaty swojej pracy naukowej Habilitant był wielokrotnie nagradzany m.in. nagrodami Rektora Uniwersytetu Wrocławskiego (w latach 2011, 2014 i 2018) oraz Stypendium dla wybitnych młodych naukowców MNiSW (w latach 2014-2017), a w latach 2014-2018 był członkiem Akademii Młodych Uczonych i Artystów (AMUiA). Habilitant wielokrotnie **prezentował swoje wyniki w formie komunikatów i wykładów na międzynarodowych konferencjach naukowych, w tym często na zaproszenie organizatorów**. Dowodem uznania środowiska naukowego dla osiągnięć Habilitanta są również liczne zaproszenia do sporządzenia recenzji artykułów naukowych w renomowanych czasopismach o obiegu międzynarodowym.

W ramach swoich obowiązków dydaktycznych Kandydat prowadził szereg kursów, w tym autorski wykład i ćwiczenia *Metody dynamiki molekularnej ab initio*. Był również opiekunem 16 prac magisterskich i 19 licencjackich. Należy również docenić zaangażowanie Kandydata w działania popularyzujące wyniki badań naukowych w ramach Dolnośląskiego Festiwalu Nauki.

Ocena osiągnięć naukowych Habilitanta

Jako osiągnięcie naukowe w rozumieniu w art. 219 ust. 1 pkt. 2 lit. b ustawy p.s.w.n Habilitant przedstawił cykl ośmiu artykułów naukowych pod wspólnym tytułem *Mechanochemia obliczeniowa – od implementacji do zrozumienia reaktywności indukowanej zewnętrzną siłą rozciągającą dla wybranych ścieżek reakcji*.

Choć mechanochemia, jak słusznie zauważył Kandydat w swoim autoreferacie, to dziedzina o korzeniach sięgających XIX wieku teoretyczny opis jej podstaw ma nieco krótszą historię, choć może nie aż tak krótką jak wynikałoby to z autoreferatu. Mechanochemia jest dziedziną chemii, w której wykorzystuje się wpływ siły zewnętrznej na właściwości chemiczne i reaktywność cząsteczek. W skrajnym przypadku siła zewnętrzna może wywołać dysocjację wiązań w cząsteczce, może też w znaczący sposób wpłynąć na charakterystykę termodynamiczną i kinetykę reakcji chemicznych. Już na początku lat 40. minionego wieku Eyring i wsp. zaproponowali teoretyczny model wyjaśniający redukcję masy cząsteczkowej polimerów pod wpływem mastykacji procesem zrywania wiązań kowalencyjnych i zaproponowali efektywny potencjał Morse'a uwzględniający zmianę energii potencjalnej pomiędzy dwoma atomami pod wpływem przyłożonej siły (Kauzmann i Eyring, w *J. Am. Chem. Soc.*, **1940**, 62, 3113). Koncepcja transformowanej pod wpływem siły powierzchni energii potencjalnej w ogólności, w tym w szczególności podejście EFEI (skrót od *External Force is Explicitly Included*) zaproponowane przez Ribas-Arino, Shigę i Marxa w 2009 roku i wykorzystane później przez Habilitanta jest w istocie bardzo podobne, przy czym zamiast modelowego potencjału wykorzystano w nim wyznaczony z pierwszych zasad potencjał Born-Oppenheimera. Jak słusznie zwraca uwagę Habilitant, podejście to jest równoważne zaproponowanemu dekadę wcześniej przez Beyera podejściu COGEF (od *CO*nstrained *Geometries simulate External Force*). W tym miejscu należałoby również wspomnieć o modelu Bella z 1978 roku (Bell w *Science*, **1978**, 200, 618), do którego odwołuje się Habilitant w pracy H1, a który był później powszechnie stosowany w opisie kinetyki reakcji mechanochemicznych. Niemniej jednak mechanochemia obliczeniowa jest istotnie stosunkowo nową dziedziną chemii teoretycznej i wkład zespołu Marxa w jej rozwój, przy znaczącym wkładzie Habilitanta, jest bez wątpienia pionierski.

W szczególności, osiągnięciem Habilitanta w zakresie rozwoju metodologii obliczeniowej jest adaptacja techniki EFEI, opracowanej i stosowanej wcześniej w zespole Marxa w obliczeniach statycznych dla układów w fazie gazowej, do symulacji dynamiki molekularnej *ab initio* techniką CPMD oraz jej implementacja i wykorzystanie w późniejszych badaniach. Choć w tym samym czasie opracowano w zespole Todda Martineza analogiczną metodologię, zastosowanie przez Habilitanta techniki metadynamiki w warunkach izotensyjnych posiada niewątpliwie przewagi i rozszerza zakres możliwych do badania procesów chemicznych. Zarówno opracowany przez Habilitanta protokół obliczeniowy, opisany w artykułach H2-H3, jak i uzyskane z jego wykorzystaniem wyniki opisane w pracach H2-H6 i H8 **stanowią niewątpliwie znaczący wkład w rozwój dyscypliny nauk chemicznych**. Cykl uzupełnia praca H1 w której przedstawiono rezultaty obliczeń statycznych nad rolą polietylenowych łańcuchów bocznych w przenoszeniu zewnętrznych sił rozciągających do centrum benzocyklobutenu jako mechanofora oraz artykuł H7. Ten ostatni dotyczy mechanochemicznej cyklorewersji 1,4-dipodstawionego 1,2,3-triazolu i wpisuje się w dyskusję na temat eksperymentu, którego wyniki opublikowano początkowo w *Science* w 2011 roku a następnie wycofano w 2015 roku z uwagi na nieskuteczne próby odtworzenia jego wyników przez szereg grup badawczych. Wprawdzie artykuł H7 ukazał się już w 2017 roku, potwierdził, że mechanizm zaproponowany przez autorów kontrowersyjnego artykułu nie jest osiągalny nawet przy wykorzystaniu dużych wartości sił rozciągających.

Jak dotąd skupiłem się na wątkach metodologicznych, gdyż te są dla mnie szczególnie interesujące. Niemniej jednak uzyskany dzięki opracowanej przez Habilitanta metodologii obliczeniowej wgląd w naturę badanych reakcji mechanochemicznych jest przynajmniej równie istotny a dla szerokiej społeczności naukowej zapewne istotniejszy. Opisane w artykule H2 wyniki uzyskane dla reakcji otwarcia pierścienia dichlorocyklopentanu pozwoliły na wytłumaczenie nieoczekiwanych rezultatów eksperymentu sonochemicznego i zależnej od siły stereoselektywności tej reakcji. W pracy H3 Habilitant i wsp. zaproponowali interpretację wyników eksperymentalnych uzyskanych techniką mikroskopii sił atomowych (AFM) dla mechanicznie aktywowanej redukcji wiązania disiarczowego w białkach, którego kinetyka zmienia się zasadniczo po przekroczeniu pewnej granicznej wartości przyłożonej siły. Odkrycie zmian konformacyjnych wywołanych przyłożoną siłą, które sterują reaktywnością chemiczną, to istotnie nowa koncepcja, która nie tylko wyjaśnia w jaki sposób takie *przełączniki dwusiarczowe* regulują funkcje białek, ale potencjalnie pozwala również na racjonalne projektowanie materiałów mechanoresponywnych. Wątek ten był kontynuowany w kolejnych pracach cyklu H4-H6, gdzie wyznaczono powierzchnie energii swobodnej dla modelowych układów z mostkiem disiarczowym oraz badano różne ścieżki zrywania wiązań S-S i C-S w funkcji zewnętrznej siły. Zwieńczeniem tych badań są wyniki opublikowane w pracy H8 nad znacznie rozbudowanym modelem z ditiotritolem jako czynnikiem atakującym, gdzie wykazano, że oddziaływania chalkogenowe pomiędzy atomami mostka disiarczowego i tlenu z grupy karbonylowej mogą kontrolować reaktywność mechanochemiczną disiarczów przy bardzo małych wartościach przyłożonej siły. To bardzo interesująca obserwacja, która zapoczątkuje być może dalsze badania oddziaływań chalkogenowych przy wykorzystaniu mikroskopii sił atomowych.

Kończąc omawianie opisanego w autoreferacie cyklu powiązanych tematycznie artykułów nie sposób raz jeszcze nie odnieść się do rangi czasopism w jakich zostały one opublikowane. Dwa artykuły z cyklu ukazały się w *Nature Chemistry* a trzy w renomowanym *Angewandte Chemie-International Edition*. Trudno o bardziej prestiżowe czasopisma w dyscyplinie nauk chemicznych. Już sam fakt przejścia przez sito recenzji i uzyskanie rekomendacji redakcji tych czasopism wiele mówi o randze naukowej uzyskanych rezultatów. Wykracza to wprawdzie poza zakres tej recenzji, pozwolę sobie jednak na uwagę, iż w mojej ocenie przedstawione osiągnięcia habilitacyjne zasługują na rekomendację do nagrody Prezesa Rady Ministrów i sądzę, że Habilitant miałby spore szanse na otrzymanie tego wyróżnienia.

Rzecz jasna uzyskane rezultaty są efektem pracy zespołowej, niemniej jednak w mojej ocenie wkład Habilitanta w ich powstanie był bez wątpienia wiodący. W większości artykułów Habilitant jest pierwszym ich współautorem, a w pięciu z ośmiu artykułów jest też autorem bądź jednym z autorów wskazanych do korespondencji. Również oświadczenia współautorów załączone do wniosku nie pozostawiają w tym względzie najmniejszych wątpliwości.

Podsumowanie i wnioski końcowe

Podsumowując, w mojej ocenie osiągnięcia naukowe dr. Przemysława Dopieralskiego, w tym przedstawiony cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych **stanowią Jego oryginalny indywidualny i znaczący wkład w rozwój dyscypliny naukowej nauki chemiczne** co wyczerpuje podstawowe ustawowe kryterium stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego.

Ponadto, choć zgodnie z tekstualną wykładnią art. 221 ust. 8 ustawy p.s.w.n. nie jest to przedmiotem tej recenzji, pozwalam sobie zauważyć, że w mojej ocenie spełnione są również pozostałe przesłanki warunkujące nadanie dr. Dopieralskiemu stopnia doktora habilitowanego, w tym wykazywanie się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni lub instytucji naukowej w szczególności zagranicznej.