

Lublin, 16.08.2021

**Recenzja dorobku naukowego oraz rozprawy habilitacyjnej doktora  
Panagiotisa Theodorakisa.**

**Ocena dorobku naukowego.**

Dr Panagiotis Theodorakis, uzyskał stopień magistra w dziedzinie nauk i inżynierii materiałowej w Uniwersytecie w Janninie (Grecja) w roku 2004. W tym samym uniwersytecie uzyskał stopień doktora w dziedzinie nauk i inżynierii materiałowej w roku 2008, po przedstawieniu rozprawy pt.: *Symulacje Monte Carlo stopów polimerowych o różnorodnej architekturze*. Po uzyskaniu stopnia doktora, w okresie od marca 2008 do października 2010, pracował w Instytucie Maxa Plancka Badań Polimerów oraz w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Johanna Gutenberga w Moguncji (Niemcy) jako stypendysta Max Planck Fellow. Następnie, od listopada 2010 do października 2012, odbył staż w Uniwersytecie w Wiedniu a następnie, od stycznia 2013 do października 2015, w Imperial Collage of London. Od października 2015, do chwili obecnej, jest adiunktem w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie. Ponadto, od lutego 2017 do chwili obecnej jest tzw. wizytującym badaczem w Centrum Ośrodków Ciągłych i Układów Złożonych na Wydziale matematyki i Fizyki Uniwersytetu w Coventry.

Dorobek publikacyjny doktora Panagiotisa Theodorakisa jest duży. Do tej pory jest On autorem, bądź współautorem 64 prac, opublikowanych w poważnych czasopismach naukowych. Jak wynika z dołączonych do wniosku materiałów, 58 artykułów zostało opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora. Wśród publikacji doktora Panagiotisa Theodorakisa są również dwa artykuły przeglądowe, które ukazały się w *Advances in Colloid and Interface Science* oraz *Fluids*. Według bazy Web of Science całkowita liczba cytowań jego prac wynosi 789 (639 bez auto-cytowań) a indeks Hirscha jest równy 16. Natomiast, według bazy Google Scholar całkowita liczba cytowań jego prac wynosi 1039, a indeks Hirscha jest równy 20. Moje doświadczenie pozwala na stwierdzenie, że baza Web of Science podaje zwykle zaniżone liczby cytowań oraz wielkości indeksu Hirscha. Dlatego też, mogę jednoznacznie stwierdzić, że prace doktora Panagiotisa Theodorakisa spotkały się z bardzo dużym zainteresowaniem środowiska naukowego.

Przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora, tematyka badawcza Habilitanta była skoncentrowana na wykorzystaniu metod symulacji molekularnych do opisu właściwości mieszanin polimerów. W szczególności, zajmował się wpływem struktury geometrycznej oraz składu chemicznego składników, na ich mieszalność. Wyniki tych badań, przedstawione w publikacjach D1-

D4, były podstawą Jego rozprawy doktorskiej. W tym samym czasie, Habilitant brał również udział w badaniach związanych z wykorzystaniem metod modelowania komputerowego do określenia wpływu siły nacisku występującej w przepływającej krwi na odkładanie się blaszek miażdżycowych w aorcie (publikacje D5 i D6). Zaproponowany model znajduje zastosowania praktyczne do obserwacji drożności naczyń wieńcowych. Badania w dziedzinie medycyny obliczeniowej kontynuował już po uzyskaniu stopnia doktora (prace A1 i A2).

Głównym nurtem badań Kandydata po uzyskaniu stopnia doktora były zagadnienia dotyczące fizyki układów polimerowych. W latach 2008-2010, badania te prowadził w Instytucie Maxa Plancka Badań Polimerów oraz w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Johannesesa Gutenberga w Moguncji, jako stypendysta Towarzystwa Maxa Plancka. Niewątpliwie, współpraca z Prof. Kurtem Binderem, który jest jednym z największych autorytetów w dziedzinie mechaniki statystycznej i metod symulacji komputerowych, oraz z prof. Wolfgangiem Paulem, miała istotny wpływ na jego rozwój naukowy. Prowadzone badania dotyczyły głównie przemian fazowych oraz struktury różnych faz w układach cylindrycznych szczotek polimerowych w stanie ciekłym, jak również w roztworach, oraz właściwości liniowych kopolimerów w roztworach. Wyniki tych badań zostały przedstawione w pracach B1-B16, opublikowanych w prestiżowych czasopismach naukowych, takich jak Journal of Chemical Physics, European Physical Journal, Journal of Physics: Condens. Matter, ACS Nano Letters, czy Soft Matter.

W latach 2010-2012 oraz 2013-2015, Habilitant odbył dwa staże naukowe, typu post-doc. W trakcie pierwszego z tych staży, w Uniwersytecie w Wiedniu oraz w Uniwersytecie Technicznym w Wiedniu, prowadził badania dotyczące samoorganizacji cząstek koloidalnych powleczonych łańcuchami polimerów. Badania te realizowane były we współpracy z profesorami Gerhardem Kahlem oraz Christopherem Dellago, a ich wyniki zaowocowały cyklem trzech publikacji (C1-C3). Drugi staż Habilitant odbył w Imperial Collage London, gdzie współpracował z profesorami Omarem Matarem, Richardem Crasterem oraz Erichem Müllerem. Prowadzone tam badania dotyczyły zagadnień z dziedziny biofizyki, a dokładniej wykorzystania modeli matematycznych do symulacji struktury i właściwości fizycznych białek. Wyniki tych badań zostały przedstawione w pracach (G1-G6).

Ważnym nurtem zainteresowań naukowych doktora Panagiotisa Theodorakisa były badania różnych modeli siatkowych, takich jak model Isinga, Potts'a i Blume-Capela. W szczególności, interesował się zagadnieniami zjawisk krytycznych oraz zbadaniem przynależności badanych układów do określonych klas uniwersalności. Badania te były prowadzone przy pomocy symulacji Monte Carlo, a wyniki zostały opublikowane w cyklu 15 prac (E1-E15).

Ogółem, po uzyskaniu stopnia doktora, Kandydat jest współautorem 48 artykułów niezwiązanych z tematyką osiągnięcia naukowego będącego podstawą ubiegania się o stopień doktora habilitowanego.

Należy również podkreślić, że doktor Panagiotis Theodorakis pełnił funkcję kierownika w czterech projektach badawczych realizowanych w IF PAN. O dużym uznaniu dokonań Kandydata świadczą również wyróżnienia jakie otrzymał (Granty na granty (2020), Marie Skłodowska-Curie Fellow (2016-2018), Premia na Horyzoncie (2018)). Został też wyróżniony przez redakcję pisma *Journal of Colloid & Interface Science* na wybitne osiągnięcia recenzenckie. Należy również wspomnieć że, w czasopismach *Soft Matter*, *Langmuir*, *European Journal of Physics E* oraz *Journal of Physics: Condensed Matter*, ilustracje z jego publikacji zostały umieszczone na stronach tytułowych tych czasopism. Jest również członkiem komitetu redakcyjnego czasopisma *American Journal of Condensed Matter Physics*, oraz był redaktorem gościnnym specjalnego wydania czasopisma *Materials*. Trzeba ponadto zauważyć, że istotnym dowodem uznania wiedzy i autorytetu naukowego doktora Panagiotisa Theodorakisa jest jego szeroka działalność recenzencka. Był recenzentem artykułów naukowych w kilkudziesięciu poważnych czasopismach, oraz projektów badawczych finansowanych przez NSF (USA), NWO (Holandia) oraz przez EPSRC (Wielka Brytania).

Doktor Panagiotis Theodorakis sprawował opiekę naukową nad trzema doktorantami oraz dwoma młodymi pracownikami naukowymi. Od roku 2016-go, prowadził też liczne kursy dla doktorantów IF PAN oraz Warszawskiej Szkoły Doktorskiej.

### **Ocena osiągnięcia naukowego będącego podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.**

Tytuł osiągnięcia naukowego, będącego podstawą wniosku doktora Panagiotisa Theodorakisa o ubieganie się o stopień doktora habilitowanego, brzmi następująco: "Nanokropelki i nanopęcherzyki na stałych podłożach: Symulacje dynamiki molekularnej zjawisk zachodzących na granicach faz". Bezpośrednią podstawą wniosku jest cykl pięciu artykułów H1-H5, oraz bezpośrednio związanych z tą samą tematyką badawczą czterech artykułów R1-R4. Chociaż nie ma wśród tego cyklu artykułów, których jedynym autorem jest Habilitant, to jak wynika z dołączonego oświadczenia (zał. 4), Jego udział w tych publikacjach był dominujący. Zdaniem recenzenta, już minęły czasy samotnych badaczy, a współpraca z uznanymi specjalistami, jak profesorowie E. A. Müller, R. V. Craster, O.K. Matar czy A. Milchev, miała niewątpliwie duży wpływ na rozwój naukowy doktora Panagiotisa Theodorakisa.

Przedstawione w publikacjach H1-H5 wyniki badań, wykonanych przy pomocy symulacji metodą dynamiki molekularnej, dotyczą obserwowanych doświadczalnie zjawisk zachodzących na granicy między stałym podłożem a umieszczonymi na nich nanokroplami cieczy lub nanopęcherzykami gazu. Zastosowana w badaniach metoda dynamiki molekularnej pozwala na obserwację ewolucji badanych układów w czasie. Szczególnie ważnym elementem takich symulacji jest możliwość monitorowania zmian struktury układu w skali cząsteczkowej, co nie jest zwykle dostępne w badaniach doświadczalnych. Ponadto, metody symulacyjne pozwalają na modelowanie dowolnych struktur badanych układów cząsteczkowych, jak też na określenie wpływu zmian potencjałów opisujących oddziaływania międzycząsteczkowe w badanych układach na ich właściwości fizykochemiczne.

Jednym z celów badań doktora Panagiotisa Theodorakisa była próba zrozumienia mechanizmu bardzo szybkiego rozlewania nanokropki wody zawierającej surfaktanty na powierzchniach hydrofobowych (tzw. superrozlewanie). Z lektury prac H1-H3, oraz R4 wynika, że wykorzystane gruboziarniste modele cząsteczek wody i surfaktantów oraz pole siłowe SAFT pozwoliły na uzyskanie wyników zgodnych z wynikami doświadczalnymi, oraz umożliwiły wyjaśnienie mechanizmu zjawiska superrozlewania. Okazało się, że kluczowym procesem dla rozlewania się kropli jest migracja, zaadsorbowanych na powierzchni kropli i na stałym podłożu, cząsteczek surfaktantu o kształcie litery T, zbudowanych z hydrofobowej „głowy” i hydrofilowych „ogonów”. Wykazano, że w przypadku surfaktantów należących do tzw. superrozlewaczy, ich migracja od powierzchni styku ciecz-gaz do powierzchni styku ciecz-ciało stałe, jest bardzo szybka. W przypadku innych surfaktantów przeważa tendencja do agregacji wewnątrz kropli, co bardzo ogranicza szybkość jej rozplývania. Jednym z ważniejszych wyników badań symulacyjnych Kandydata było pokazanie, że poza kształtem, bardzo ważnym czynnikiem prowadzącym do superrozlewania jest skład chemiczny surfaktantów.

Badania nad mechanizmem zjawiska superrozlewania uważam za bardzo ważne, gdyż ich wyniki mogą mieć istotne znaczenie praktyczne. Przede wszystkim, mogą być bardzo pomocne przy projektowaniu surfaktantów o określonych własnościach.

Innym zjawiskiem badanym przez Habilitanta był swobodny ruch nanokropki cieczy po powierzchni podłoża o zmiennej twardości, czyli tzw. durotaksja. W prowadzonych badaniach wykorzystano metodę dynamiki molekularnej. Znowu, badane zjawisko nie jest nieznane gdyż występuje w rozmaitych układach, np. biologicznych. Celem symulacji było określenie wpływu różnych czynników, takich jak wielkość kropli, gradient twardości stałego podłoża oraz lepkości cieczy na ruchy durotaktyczne nanokropki. Zastosowany model jest dosyć prosty, a jednocześnie uwzględnia najważniejsze w tego typu badaniach czynniki. W celu uzyskania stabilnych, nie

parujących, kropli badano układy złożone z łańcuchów polimerów. Zmiany długości łańcuchów polimerów pozwalały na modelowanie układów o różnej lepkości. Aby modelować gradient twardości podłoża w wybranym kierunku, zmieniano stałą siłowa potencjału harmonicznego działającego między atomami tworzącymi podłoże. Wykazano, że średnia prędkość ruchu durotaktycznego kropli, od miękkiego do twardego podłoża, rośnie wraz ze wzrostem gradientu twardości podłoża oraz ze wzrostem energii oddziaływania między kroplą i podłożem. Ponadto wyniki prowadzonych badań pokazały, że na prędkość ruchów durotaktycznych wpływają również rozmiary kropli jak i lepkość cieczy. Bardzo ważnym elementem tych badań było wyjaśnienie mechanizmu powodującego zmiany prędkości ruchu kropli. W szczególności, pokazano, że podstawowym czynnikiem wywołującym durotaktyczny ruch kropli obniżenie całkowitej energii układu, podczas przemieszczania się kropli w kierunku twardszego podłoża.

Jeszcze innym problemem badanym przez Habilityanta w ramach cyklu habilitacyjnego, był mechanizm powstawania oraz przyczyny dużej stabilności nanopęcherzyków gazu powstających na powierzchniach ciał stałych zanurzonych w cieczach z rozpuszczonymi gazami. Korzystając z wyników doświadczalnych, badał On powstawanie nanopęcherzyków tlenu i azotu rozpuszczonych w wodzie będącej w kontakcie z powierzchnią wysoce uporządkowanego grafitu pirolitycznego. Wykorzystując metodę dynamiki molekularnej pokazał, mechanizm tworzenia się nanopęcherzyków na powierzchni grafitu, oraz przedstawił przekonujące argumenty uzasadniające ich wysoką stabilność. Za bardzo ciekawy wynik, uważam pokazanie, że gęstość nanopęcherzyków jest niemal równa połowie gęstości fazy ciekłej co determinuje ich dużą stabilność z uwagi na duży udział przyciągających oddziaływań van der Waalsa.

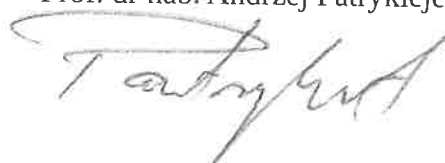
## **Podsumowanie**

Lektura publikacji doktora Panagiotisa Theodorakisa dostarcza dowodów jego szerokiej wiedzy w dziedzinie mechaniki statystycznej, ze szczególnym uwzględnieniem fizyki zjawisk powierzchniowych, teorii przemian fazowych, fizykochemii polimerów oraz układów koloidalnych. Należy również zauważyć doskonałą znajomość metod symulacji Monte Carlo oraz dynamiki molekularnej. Jest on już uznanym w świecie specjalistą we wspomnianych wyżej dziedzinach, czego dowodem jest duża liczba cytowań jego publikacji, kierownictwo projektami badawczymi, oraz to, że był proszony o recenzje artykułów przez redakcje kilkudziesięciu czasopism naukowych.

Zdaniem recenzenta, wniosek doktora Panagiotisa Theodorakisa spełnia wszystkie wymagania ustawy o stopniach i tytułach naukowych i tytułach w zakresie sztuki, stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Niniejszym stawiam wniosek o nadanie

doktorowi Panagiotisowi Theodorakisowi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Prof. dr hab. Andrzej Patrykiewicz

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'A. Patrykiewicz', written in a cursive style.