



University of Warsaw
Faculty of Physics
Institute of Theoretical Physics



Pasteura 5, 02-093 Warszawa, tel.: (0-22)6283396, fax: (0-22)6219475, e-mail: iftuw@fuw.edu.pl

Warszawa, 30 sierpnia 2021

prof. dr hab. Piotr Szymczak
tel. (22)55 32 909, 504464665
e-mail: pa.szymczak@fuw.edu.pl

Ocena dorobku naukowego i osiągnięcia naukowego
„Nanokropelki i nanopęcherzyki na stałych podłożach: symulacje
dynamiki molekularnej zjawisk zachodzących na granicach faz”
dr. Panagiotisa Theodorakisa

1. Sylwetka habilitanta

Panagiotis Theodorakis ukończył w 2004 roku studia magisterskie w zakładzie Zakład Nauk i Inżynierii Materiałowej, Uniwersytet w Janinie, Grecja (2008). Następnie w tej samej jednostce rozpoczął studia doktoranckie. W roku 2008 obronił pracę doktorską z zakresu inżynierii materiałowej pt. „Monte Carlo simulation of polymer blends with variable architecture” pod kierunkiem prof. Apostolosa Avgeropoulosa. Po doktoracie wyjeżdża na półtoraroczny staż do Moguncji, do grupy prof. Kurta Bindera na Uniwersytecie Jana Gutenberga. Następny staż podoktorski odbywa w Wiedniu, u prof. Christopha Dellago i Gerharda Kahla (2010-1012). W końcu trzeci staż podoktorski odbywa w Imperial College w Londynie, we współpracy z prof. Prof. Omarem Matarem, Richardem Crasterem i Erichem Müllerem. Te trzy staże podoktorskie, w świetnych grupach naukowych zajmujących się bardzo różną tematyką w wysokim stopniu ukształtują sylwetkę naukową Habilitanta jak i jego szerokie spektrum zainteresowań naukowych. Od października 2015 roku dr Theodorakis jest adiunktem w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk.

2. Dorobek naukowy

Dorobek naukowy dr. Theodorakisa robi bardzo pozytywne wrażenie – jest to dorobek bogaty (62 publikacje), dobrze cytowany (ponad 600 cytowań) i bardzo wszechstronny. Imponująca jest wielość zagadnień podejmowanych przez Habilitanta – od chemii fizycznej i dynamiki układów polimerowych, poprzez układy spinowe i klasyczną fizykę statystyczną, aż po fizykę materii miękkiej i biologicznej, a nawet medycynę obliczeniową. Klucza do zrozumienia tak szerokiego spektrum aktywności naukowej Habilitanta dostarcza lektura jego oświadczeń o wkładzie w poszczególne artykuły – w większości z nich zadaniem dr. Theodorakisa było skonstruowanie modelu numerycznego układu i przeprowadzenie symulacji numerycznych. Widać więc wyraźnie, że dr Theodorakis jest wysoce wykwalifikowanym ekspertem w modelowaniu komputerowym, szczególnie przy użyciu technik dynamiki molekularnej i modeli gruboziarnistych. Potrafi nawiązywać i utrzymywać kontakty naukowe, jest aktywny jednocześnie na kilku polach (najnowsze prace – z ostatniego roku – ciągle pokazują bardzo bogate spektrum podejmowanych problemów: od fizyki białek, poprzez modele spinowe, do dynamiki nanokropel). Rzuca się też w oczy duża skuteczność dr. Theodorakisa w pozyskiwaniu grantów – był kierownikiem grantu Polonez, Sonata oraz Opus a także polskim partnerem w grantie europejskim z programu Horyzont 2020. Jeśli dodamy do tego dużą aktywność konferencyjną, spora ilość prowadzonych wykładów dla doktorantów IF PAN, wiele wizyt naukowych i dużą liczbę recenzji artykułów a także i grantów, otrzymamy obraz wybitnego i bardzo aktywnego młodego naukowca o wielkiej energii twórczej i bogatym warsztacie, przede wszystkim numerycznym. Spełniony jest też wymóg wykazywania się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej instytucji naukowej – dr Theodorakis pracował przez dłuższy czas w czterech instytucjach (Instytut Maxa Plancka w Moguncji, Uniwersytet Wiedeński, Imperial College w Londynie oraz IF PAN).

3. Osiągnięcie naukowe

Cykl prac składających się na osiągnięcie naukowe „Nanokropelki i nanopęcherzyki na stałych podłożach: symulacje dynamiki molekularnej zjawisk zachodzących na granicach faz” jest spójny i monotematyczny: dotyczy dynamiki kropeł i bąbelków przy powierzchni, w szczególności zjawiska nadrozpływu (superspreading) [H1-H3], dynamiki nanobąbelków [H5] oraz durotaksji [H4]. Warto podkreślić, że są to wszystko tematy bardzo aktualne, na froncie badań, podsycane coraz to nowymi wynikami eksperymentalnymi. Z pierwszej grupy prac wyróżnia się praca [H2] w Langmuir, która znalazła odzew w środowisku naukowym (ponad 30 cytowań), a która – za pomocą gruboziarnistych symulacji numerycznych – wyjaśnia mechanizmy fizyczne nadrozpływu, w szczególności zwracając uwagę na rolę translokacji surfaktantów z powierzchni rozdziału faz ciecz-gaz poprzez linię kontaktu ciecz-gaz-ciało stałe i ich późniejszą adsorpcję na podłożu oraz na konieczność synchronizacji tego procesu z transportem surfaktantu z wnętrza kropli. Pracę [H2] uzupełniają publikacje [H1] i [H3], razem stanowiąc kompleksowe studium numeryczne zjawiska nadrozpływu. W pracach tych zastosowano dość wyrafinowane gruboziarniste pole siłowe konstruowane w oparciu o metodę SAFT (ang. Statistical Associating Fluid Theory), w której analitycznie sparametryzowane na podstawie danych eksperymentalnych (tj. diagramów fazowych czystych składników) równanie stanu opisuje niekowalencyjne oddziaływania międzycząsteczkowe przy pomocy potencjału Mie, zaś wiązania i kąty pomiędzy kulkami tworzącymi daną cząsteczkę, opisane są potencjałami harmonicznymi. Pole to z dużą dokładnością odtwarzało oddziaływania pomiędzy cząsteczkami wody, surfaktantu i podłoża, pozwalając na symulowanie różnych rodzin surfaktantów. W szczególności umożliwiło to przeprowadzenie symulacji zarówno dla surfaktantów prowadzących do nadrozpływu jak i dla takich, dla których to zjawisko nie występuje i określenie, które cechy surfaktantu są tu kluczowe. Udało się dzięki temu uzupełnić model dynamiki nadrozpływu (sformułowany wcześniej przez m.in. przez O.K. Matara ze współpracownikami) o nowe szczegóły – kluczowa jest tu dynamika ruchu surfaktantów, które przemieszczają się z powierzchni kontaktu ciecz-gaz poprzez linię kontaktu ciecz-gaz-podłoże na powierzchnię substratu, gdzie zostają adsorbowane. W wyniku adsorpcji zmniejsza się liczba cząsteczek surfaktantu na powierzchni kropli, i właśnie efektywne uzupełnienie tego niedoboru za pomocą transportu surfaktantu z wnętrza kropli jest kluczowe dla zaistnienia zjawiska nadrozpływu. Habilitantowi udało się w szczególności pokazać, że kształt cząsteczek surfaktantu – choć

ważny – determinuje efektywność tego procesu w mniejszym stopniu niż skład chemiczny surfaktantu.

Z pozostałych prac składających się na osiągnięcie habilitacyjne warto wyróżnić bardzo interesującą pracę [H5] dającą wgląd w mechanizmy powstawania i rozpuszczania się nanobąbelków – ich zaskakująca stabilność jest wciąż słabo zrozumiana pod względem teoretycznym. Nanobąbelki – jak sama nazwa wskazuje – mają bardzo małe promienie, a stąd laplasowskie ciśnienie w ich wnętrzu jest bardzo duże, co powinno prowadzić do ich szybkiego rozpuszczania w cieczy. Tak się jednak nie dzieje, co pokazały badania z wykorzystaniem mikroskopii sił atomowych. Badania pełnoatomowej dynamiki molekularnej dr. Theodorakisa rzucają światło na to zagadkowe zachowanie. Po pierwsze pokazano, że gęstość powietrza w nanobąbelkach była stukrotnie większa niż gęstość powietrza w warunkach normalnych, a zatem powietrze w bąbelkach zachowuje się bardziej jak faza ciekła niż gazowa. Konsekwencją tak bardzo gęstego upakowania jest przewaga wkładu potencjalnego nad kinetycznym w ich energii i w rezultacie zwiększona stabilność. Warto podkreślić, że późniejsze badania eksperymentalne potwierdziły przewidywania numeryczne dr. Theodorakisa dotyczące gęstości powietrza w nanobąbelkach. Wykazano również, że bardzo istotną rolę w stabilizacji pęcherzyków odgrywa oddziaływanie z podłożem – w szczególności pinning do niejednorodności na powierzchni substratu.

Trzecie z zagadnień – durotaksja, czyli przemieszczanie się kropeł w kierunku fragmentów podłoża o większej sztywności – jest równie intrygujące, choć praca [H4], która o nim traktuje, wydaje się mieć charakter bardziej przyczynkowy. Badania dynamiki molekularnej dr. Theodorakisa potwierdziły, iż ruch kropli jest tym intensywniejszy im większy jest gradient sztywności podłoża, silniejsze oddziaływanie między kroplą a substratem oraz mniejsza sama kropla bądź jej lepkość. Te wyniki – choć interesujące – były już w większości znane z prac innych badaczy. Ciekawsza jest przeprowadzona przez Habilitanta analiza sił wywołujących ruch kropli, pokazująca, że główną rolę gra tu redukcja energii pomiędzy cząsteczkami kropli a substratem wynikająca ze zwiększenia liczby kontaktów w miarę przesuwania się w kierunku sztywniejszej powierzchni.

Podsumowując, nie ulega dla mnie wątpliwości, że cały cykl prac badawczych [H1-H5] stanowi znaczny i cenny wkład w rozwój fizyki materii miękkiej, a dr Panagiotis Theodorakis jest świetnie zapowiadającym się młodym badaczem o dużym potencjale, specjalizującym się w modelowaniu numerycznym płynów złożonych i materii miękkiej. W mojej opinii przedstawione przez dr. Panagiotisa Theodorakisa osiągnięcia naukowe naukowe w postaci

cyklu powiązanych tematycznie publikacji pt. „Nanokropelki i nanopęcherzyki na stałych podłożach: symulacje dynamiki molekularnej zjawisk zachodzących na granicach faz” oraz jego dorobek naukowy spełniają wymagania stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego zgodnie z art. 219 ust. 1 . pkt.2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z pzn. zm.) i wnioskuję o dopuszczenie go do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

P. Szymul.