

Dr hab. Czesław Ślusarczyk, prof. ATH

Bielsko-Biała 27. 12. 2019 r.

Instytut Inżynierii Tekstyliów i Materiałów Polimerowych  
Akademia Techniczno-Humanistyczna w Bielsku-Białej

### Recenzja

pracy doktorskiej mgr inż. Tomasza Kozika

nt. „*Modeling of the structure of molecular and macromolecular systems using molecular dynamics and artificial intelligence as complementary methods*”

wykonanej pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Wojciecha Łuznego.

Promotor pomocniczy: dr inż. Maciej Śniechowski

Cel pracy i zagadnienia badawcze. Praca doktorska mgr inż. Tomasza Kozika dotyczy modelowania na poziomie molekularnym struktury wybranych układów polimerowych. Modelowanie zostało przeprowadzone przy pomocy dwóch odmiennych technik obliczeniowo-symulacyjnych, mianowicie dynamiki molekularnej (MD) i algorytmów sztucznej inteligencji (AI). Stąd, oprócz podstawowego celu pracy jakim było stworzenie modeli struktury konkretnych, badanych w pracy układów polimerowych, drugim celem pracy było wypracowanie nowatorskiej metodologii, łączącej te dwie techniki tak, aby w sposób efektywny i uniwersalny wyznaczać struktury krystalitów polimerowych na podstawie eksperymentalnych danych, uzyskanych z dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego i/lub neutronów.

Rozszyfrowanie struktury krystalicznej polimeru w stanie stałym, na podstawie uzyskanego eksperymentalnie obrazu dyfrakcyjnego, jest, ze względu specyfikę tworzenia się tej struktury, zagadnieniem daleko bardziej skomplikowanym, niż pozostałych materiałów badanych przez fizykę ciała stałego. Trudności wynikają z faktu, że duże, długie makrocząsteczki, z których zbudowany jest polimer, nie są w stanie w całości uporządkować się i utworzyć klasycznie rozumianą strukturę krystaliczną. W rzeczywistości, potwierdzonej eksperymentalnie wieloma technikami badawczymi, tylko pewne segmenty łańcucha polimerowego porządkują się, tworząc krystality, pozostałe zaś segmenty układają się chaotycznie, tworząc obszary amorficzne. Obraz dyfrakcyjny takiej struktury jest zatem sumą rozpraszania na obszarach krystalicznych, obszarach amorficznych i na stosunkowo szerokich granicach między tymi obszarami. Oprócz tego na obraz ten nakłada się relatywnie silne tło, pochodzące od wszelkiego rodzaju defektów, których w polimerach jest na ogół duża koncentracja, rozpraszanie Comptona oraz rozpraszanie od ewentualnych domieszek lub zanieczyszczeń.

Podstawowym wymogiem rozpoznania uporządkowania w obrębie krystalitu polimerowego jest wydzielenie z całego dyfraktogramu składowej pochodzącej od rozpraszania w tych obszarach. Dopiero wówczas, poprzez analizę tej składowej, można pokusić się na odtworzenie uporządkowania na poziomie komórki elementarnej. Użycie terminu „pokusić się” odzwierciedla fakt, że i tutaj badacz styka się z trudnościami, wynikającymi z tego, że krystality polimerów są stosunkowo niewielkie i w znacznym stopniu zdefektowane. Stąd na krzywych dyfrakcyjnych widoczna jest niewielka ilość, często słabych, rozmytych maksimum dyfrakcyjnych. Rzadko pojawiają się piki wyższych rzędów, są to zazwyczaj piki od płaszczyzn o niskich wskaźnikach Millera.

W tej sytuacji od szeregu lat wykorzystuje się modelowanie komputerowe, pozwalające na obliczenie teoretycznego obrazu dyfrakcyjnego dla założonego modelu struktury i porównanie go z obrazem eksperymentalnym. Poprzez zmiany tego modelu i jego uszczegóławianie dąży się do jak najlepszej zgodności położenia i natężeń maksimum dyfrakcyjnych teoretycznego i eksperymentalnego dyfraktogramu. Obserwowany w ostatnich latach stały rozwój zarówno technik obliczeniowych jak i optymalizacyjnych, opartych na algorytmach sztucznej inteligencji, pozwala na coraz dokładniejsze określanie coraz bardziej złożonych struktur, tworzących się w najrozmaitszych układach polimerowych.

W tym kontekście mgr inż. Tomasz Kozik podejmuje w swej rozprawie doktorskiej ambitne i ważne zagadnienia, związane z określaniem złożonego uporządkowania w polimerach przewodzących i w sposób nowatorski wskazuje na możliwości, jakie daje połączenie dynamiki molekularnej i algorytmów rojowych sztucznej inteligencji. Również przedstawione w niniejszej pracy modelowanie wielowarstwowych układów polimerowych, składających się z warstw zarówno amorficznych jak i uporządkowanych, stanowi dla badacza trudne, lecz interesujące wyzwanie.

Przedłożona praca doktorska jest napisana w języku angielskim i liczy 277 stron. Jej treść została podzielona na 5 rozdziałów, przy czym w rozdziale piątym, w sposób syntetyczny, zostały zawarte wnioski wynikające z pracy. Rozdziały te są poprzedzone streszczeniami pracy w języku polskim i angielskim oraz sformułowaniem celu pracy. Na końcu pracy została podana bibliografia, licząca 124 pozycje oraz wykaz dorobku Doktoranta, dotyczący problematyki badawczej, której poświęcona jest dysertacja, a także dwa uzupełnienia (Appendix A i B), przedstawiające szczegółowo metodę równoważenia ładunku (QEQ) oraz teorię kwazielastycznego rozpraszania neutronów (QENS). Dorobek naukowy w zakresie problematyki pracy obejmuje 7 artykułów w prestiżowych czasopiśmie naukowych ( w 5 z nich mgr inż. Tomasz Kozik jest pierwszym autorem) oraz 6 wystąpień konferencyjnych w formie posterów i wystąpień ustnych.

Wyniki badań i ich naukowe znaczenie. Pierwszy rozdział pracy, zgodnie ze swoim tytułem „*Theoretical background*”, stanowi bardzo spójny i przejrzyste zredagowany przegląd podstawowych informacji i pojęć wykorzystywanych w zasadniczej części rozprawy. Podaje podstawowe pojęcia stosowane dla opisu struktur krystalicznych, omawia podstawy dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na tych strukturach, w tym zagadnienie obliczania teoretycznego rozkładu natężenia tego promieniowania rozproszonego na kryształach. Następnie omawia elementy fizyki polimerów w stanie stałym i przedstawia szczegółowo zasady obliczeń z zastosowaniem metody dynamiki molekularnej. Rozdział kończy omówienie trzech rodzajów algorytmów rojowych wykorzystanych w pracy dla optymalizacji parametrów uzyskanych techniką dynamiki molekularnej. Zasadniczą część rozprawy stanowią następane trzy rozdziały, dotyczące trzech odrębnych zagadnień badawczych, zawierające wszystkie uzyskane przez Doktoranta wyniki oraz ich dyskusję. W tej części pracy należy wysoko ocenić samą koncepcję przeprowadzenia obliczeń i symulacji o istotnym wpływie na wiedzę o układach, których dotyczyły.

Pierwszym zagadnieniem badawczym, opisanym w rozdziale drugim pracy „*The structural properties of PANI/CSA*”, było modelowanie, w celu opracowania modelu komórki elementarnej, struktury układu polimerowego, powstałego w wyniku domieszkowania polianiliny (PANI) kwasem kamforosulfonowym (CSA). Poszukiwania modelu struktury tego układu, jednego z najważniejszych polimeru przewodzącego, mają blisko dwudziestoletnią historię, w której kluczowe znaczenie mają prace zarówno samego promotora recenzowanej pracy prof. Wojciecha Łuźnego jak i kierowanego przez niego zespołu badawczego. W tym kontekście wyniki uzyskane przez mgr inż. Tomasza Kozika są kolejnym istotnym, bo finalnym krokiem na drodze poznania struktury krystalicznej układu PANI/CSA. W systemie tym powstaje struktura naprzemiennych dwuwarstw złożonych odpowiednio z łańcuchów PANI i molekuł CSA. Opracowany przez Doktoranta nowy model komórki elementarnej, należącej do układu trójskośnego, w przeciwieństwie do istniejących wcześniej modeli, jest w pełni zgodny z danymi eksperymentalnymi uzyskanymi, przy pomocy różnych technik badawczych (dyfrakcja rentgenowska i neutronowa), dla różnych postaci układu PANI/CSA (proszki, folie wylane, folie stekstrowane). Zdaniem recenzenta opracowanie tego modelu jest najważniejszym osiągnięciem Doktoranta. Ten znaczący sukces naukowy mgr inż. Tomasz Kozik osiągnął dzięki wypracowaniu metodologii pozwalającej harmonijnie połączyć symulacje metodą dynamiki molekularnej z wykorzystaniem algorytmów sztucznej inteligencji, jakimi są algorytmy rojowe, w celu optymalizacji parametrów komórki elementarnej, otrzymanej w modelowaniu MD. Dla przeprowadzenia tej

optymalizacji, polegającej na dopasowaniu obliczonego teoretycznie obrazu dyfrakcyjnego do danych doświadczalnych, Doktorant stworzył własny program komputerowy PolyAna. Opracowana w recenzowanej pracy metodologia ma charakter uniwersalny, tzn. może być wykorzystana do określania struktury krystalicznej innych układów polimerowych, na podstawie wykonanych dla tych układów pomiarów metodami dyfrakcyjnymi. Stanowi więc ona dodatkowy walor pracy.

W rozdziale trzecim „*The interaction between PMMA and SAMs*” zostały przedstawione wyniki modelowania oddziaływania cienkiej warstwy polimetakrylanu metylu (PMMA) o różnej taktyczności z tiolową monowarstwą organiczną samoorganizującą (self-assembly - SAM) naniesioną na cienką warstwę złota. Problematyka badań cienkich wielowarstwowych układów organicznych, mających na celu modyfikację transportu ładunku poprzez interfejs przewodnik/warstwa organiczna, jest wyjątkowo aktualna i uzasadniona, gdyż wpisuje się w jeden z najbardziej istotnych problemów związanych z dalszym rozwojem i optymalizacją urządzeń elektroniki organicznej takich jak OLED, OFET czy OPV.

Badana w pracy monowarstwa SAM składała się z dwóch rodzajów molekuł, różniących się w swej budowie chemicznej grupami końcowymi. Jeden rodzaj molekuł zawierał grupę metylową  $\text{CH}_3$ , drugi grupę karboksylową  $\text{COOH}$ . Utworzone z tych molekuł bloki zostały oznaczone w pracy jako SAM- $\text{CH}_3$  i SAM- $\text{COOH}$ . Ten typ warstw został otrzymany i zbadany przez dr inż. Mateusza Marca w jego pracy doktorskiej. W pracy tej, za pomocą kelwinowskiej mikroskopii sił (KPFM) wyznaczono zmiany kontaktowej różnicy potencjału ( $V_{\text{CPD}}$ ) i stwierdzono znaczną różnicę wartości tego parametru w przypadku, gdy warstwa SAM pokryta była ataktycznym PMMA w porównaniu z układami, w których SAM pokryte było izotaktycznym lub syndiotaktycznym PMMA.

Właśnie ta zaskakująca zależność wartości  $V_{\text{CPD}}$  od taktyczności warstwy polimerowej, przekładająca się na zmianę pracy wyjścia elektronów z podłoża Au, stała się inspiracją dla mgr inż. Tomasza Kozika do podjęcia modelowania oddziaływań SAM z PMMA. Przed przystąpieniem do realizacji wyznaczonego celu Doktorant dokonał modelowania tworzenia się samych monowarstw SAM, a także modelowania adsorpcji tych warstw na płaszczyźnie (111) utworzonej przez atomy złota. Takie modelowanie wydaje się konieczne dla realizacji głównego celu, tzn. zrozumienia oddziaływań SAM/PMMA. Podjęcie tych wstępnych badań świadczy o dojrzałości badacza, potrafiącego nie tylko sformułować cel badań, ale zaprojektować niezbędne etapy prowadzące do jego osiągnięcia. Ponadto szczegółowy opis wszystkich uwarunkowań, które należy uwzględnić w modelowaniu, a także krytyczna dyskusja tych warunków świadczy o szerokiej wiedzy i dużej praktyce prowadzenia obliczeń.

Uzyskane w wyniku modelowania równowagowe ułożenie się molekuł SAM na powierzchni Au charakteryzuje się odchyleniem osi molekuł od kierunku pionowego o kąt ok.  $30^\circ$ , co bardzo dobrze odpowiada danym literaturowym, dotyczącym podobnych warstw. Również wartości najważniejszego parametru fizycznego, opisującego warstwę samoorganizującą, jakim jest składowa normalna gęstości momentów dipolowych molekuł SAM, dobrze zgadza się z danymi literaturowymi. Wartości tej składowej są niższe od wartości teoretycznej, gdyż, jak zauważa Doktorant, w rzeczywistości ułożenie molekuł w warstwie obarczone jest licznymi defektami. Słusznie więc tak wymodelowana warstwa SAM była podstawą do zasadniczych dla pracy badań jej oddziaływań z cienką warstwą polimerową PMMA.

W recenzowanej pracy modelowano 4 typy warstw PMMA, składające się z 12 łańcuchów po 150 merów każda. Warstwy różniły się taktycznością makrocząsteczek. Ponadto dla każdego typu warstwy przyjęto dwa modele wstępnego, geometrycznego ułożenia makrocząsteczek w warstwie. Modelowanie procesu pokrycia monowarstwy SAM polimerem zostało przeprowadzone metodą „die casting”, umiejętnie zmodyfikowaną przez Doktoranta w celu uniknięcia naruszenia układu SAM/Au w sposób nierzeczywisty. Wynik modelowania badanego układu wielowarstwowego został poddany analizie pod kątem amorficzności warstwy PMMA, wpływu PMMA na własności monowarstwy SAM i jej adsorpcji na powierzchni Au, tworzenia się wiązań wodorowych między PMMA i SAM oraz polaryzacji PMMA.

Analiza, przeprowadzona przy pomocy funkcji rozkładu radialnego (RDF), wykazała, że każdy rodzaj warstwy PMMA jest w pełni amorficzny. Obliczenia pokazały także, że naniesiona na SAM warstwa polimeru nie zmienia zarówno geometrycznego ułożenia molekuł w tej warstwie jak i nie wpływa znacząco na jej adsorpcję do podłoża Au. Stwierdzono jedynie niewielki wzrost wartości składowej normalnej gęstości momentów dipolowych, ale zróżnicowanie tego wzrostu od taktyczności PMMA jest zbyt małe, by mogło tłumaczyć obserwowane doświadczalnie zmiany potencjału  $V_{CPD}$ .

Nałożenie warstwy polimerowej na warstwę samoorganizującą stworzyło możliwość powstawania dodatkowych wiązań wodorowych między grupami karboksylowymi bloków SAM-COOH, a grupami estrowymi łańcuchów PMMA. Doktorant wykazał jednak, że ilość tych wiązań nie zależy od taktyczności PMMA, a więc wiązania wodorowe nie mają wpływu na zmiany potencjału  $V_{CPD}$ . Jest to duże osiągnięcie mgr inż. Tomasza Kozika, gdyż w pracy dr inż. Mateusza Marca, do której odnoszą się wyniki opisywanego modelowania, właśnie tworzeniem się tych wiązań tłumaczono największe zmiany potencjału  $V_{CPD}$  w układach z ataktycznym PMMA.

Najważniejszym wnioskiem wypływającym z analizy wyników modelowania w tej części pracy jest wykazanie, że przyczyną zmian potencjału  $V_{CPD}$  jest wpływ momentów dipolowych warstwy samoorganizującej się na naniesioną na nią warstwę PMMA, prowadzący do wytworzenia się lokalnych momentów dipolowych w warstwie polimerowej. Istotą oddziaływań jest elektrostatyczne przyciąganie między polarnymi grupami końcowymi warstwy SAM i merami łańcucha PMMA, obdarzonymi momentami dipolowymi, ułożonymi bezpośrednio w pobliżu grup polarnych. Tak więc istota oddziaływań PMMA i SAM ma miejsce w interfejsie między tymi warstwami i w naturalny sposób zależy od geometrycznego usytuowania merów, zależnego od taktyczności łańcuchów PMMA. Najkorzystniejszym jest układ, w którym krótkie izotaktyczne segmenty łańcucha poprzedzielane są bardziej giętkimi segmentami syndiotaktycznymi, umożliwiającymi im wtopienie się w losowo splątana amorficzną strukturę PMMA.

Tak więc mgr inż. Tomasz Kozik w tym rozdziale swojej pracy doktorskiej wykazał, że powłoka polimerowa naniesiona na warstwę SAM działa nie tylko jako warstwa ochronna, ale w istotny sposób może zmieniać pracę wyjścia elektronów z metalicznego podłoża układu wielowarstwowego. Powlekanie więc monowarstwy organicznej polimetakrylanem metylu o zadanej taktyczności daje możliwość regulowania pracy wyjścia układu wielowarstwowego, co bezpośrednio wpływa na zastosowanie takich układów w optoelektronice i znaczący rozwój tej dziedziny. Możliwość ta na teraz jest teoretyczna, niemniej jednak recenzent uważa, że te wskazówki wynikające z badań mgr inż. Tomasza Kozika są cenne, gdyż wytyczają ścieżki badawczych poszukiwań dla wielu grup naukowców.

Rozdział czwarty „*The structure and dynamics of doped PEDOT systems*” przedstawia wyniki modelowania struktury i dynamiki układów polimerowych wytworzonych w oparciu o domieszkowanie poli(3,4-etylenodioksytiofenu), znanego pod skróconą nazwą PEDOT. W tym przypadku również mgr inż. Tomasz Kozik podjął aktualną i ważną tematykę badawczą ze względu na to, że PEDOT posiada najwyższą dobroć termoelektryczną spośród organicznych materiałów termoelektrycznych i wyniki tych badań mogą mieć istotne znaczenie dla rozwoju tych materiałów i ich zastosowań jako giętkich generatorów termoelektrycznych.

W pracy badano układy domieszkowane anionami tosyłanowymi (oznaczone jako PEDOT:Tos), anionami triflate (PEDOT:OTf), anionami wodorosiarczanowymi (PEDOT:HSulf) i siarczanowymi (PEDOT:Sulf). Spośród tych układów w literaturze można znaleźć informacje odnoszące się jedynie do struktury układu PEDOT:Tos. Celem badań podjętych w recenzowanej pracy było określenie, czy i w jaki sposób struktura tego układu zostaje zmieniona, gdy aniony tosyłanowe

zostaną zastąpione, różniącymi się od nich rozmiarami, anionami OTf, HSulf i Sulf. Wykorzystując opracowaną przez siebie metodologię określania struktury krystalicznej polimerów, opisaną w rozdziale II niniejszej pracy, Doktorant stworzył modele budowy wszystkich badanych układów i stwierdził, że wbrew wcześniejszym założeniom, struktury tych układów są w dużym stopniu odmienne.

Struktura układu PEDOT:Tos składa się z niemal płaskich warstw utworzonych przez łańcuchy PEDOT, rozdzielonych przez warstwy, składające się z anionów tosylianowych, przy czym warstwy tosylianowe nie są identyczne, lecz nieco przesunięte względem siebie. Otrzymana w modelowaniu odległość 1,39 nm między warstwami polimerowymi bardzo dobrze odpowiada danym literaturowym (1,40 nm). Zastąpienie anionów tosylianowych mniejszymi od nich anionami triflate powoduje, że struktura układu PEDOT:OTf, pozostając nadal warstwową, staje się mniej uporządkowana i bardziej zwarta (odległości między warstwami PEDOT maleją do wartości 1,17 nm). Aniony triflate tworzą, w obrębie swojej warstwy, strukturę pseudoheksagonalną, a więc inną od prostokątnego ułożenia anionów tosylianowych. W przypadku układu PEDOT:Sulf, domieszkowanego najmniejszym z badanych anionów – anionem siarczanowym – struktura staje się jeszcze bardziej nieuporządkowana, chociaż nadal przedstawia strukturę warstwową. Odległość między warstwami maleje do wartości 1,09 nm. Warstwa składająca się z anionów jest w dużym stopniu nieuporządkowana, chociaż można w niej wyróżnić obszary bardziej uporządkowane, w których aniony siarczanowe tworzą sieć prostokątną. Dla układu PEDOT:HSulf, zawierającego aniony wodorosiarczanowe o rozmiarach pośrednich w stosunku do rozmiarów anionów OTf i Sulf, Doktorant stwierdził możliwość tworzenia się struktur o cechach zbliżonych do struktur dwóch poprzednich układów, gdyż w modelowaniu metodą MD obie te struktury wykazywały cechy stabilności. Tak więc, wydaje się, że o aktualnej strukturze układu PEDOT:HSulf mogą decydować czynniki zewnętrzne. Wyniki uzyskane w tej części badań wskazują zatem jednoznacznie na zależność struktury układów PEDOT od rozmiaru jonów domieszki.

Uwagi krytyczne. Recenzowana dysertacja mgr inż. Tomasza Kozika jest opracowaniem obszernym, w którym Autor wiele uwagi przywiązuje do wielu szczegółów przyjętych założeń i warunków wstępnych prowadzonych obliczeń, dyskutując i wyjaśniając najrozmaitsze uwarunkowania ich prowadzenia. Zdaniem recenzenta doprecyzowania wymagają następujące zagadnienia:

(i) sposób rozdzielania krzywej dyfrakcyjnej na składowe rozpraszania od obszarów amorficznych i krystalicznych w badanych polimerach. Zagadnienie to jest kluczowe z punktu widzenia

późniejszego modelowania składowej krystalicznej. Rysunek II.5 (str. 72) przedstawia rozdzielanie dyfraktogramu, a w jego podpisie znajduje się jedyna informacja, że zastosowano krzywą Lorentza. Czy kształt rozpraszania od obszarów amorficznych odtwarza 1 krzywa Lorentza, która ma kształt symetryczny, a przebieg składowej amorficznej na rysunku jest asymetryczny ?

(ii) sądząc po skali natężenia rozpraszania, składowa krystaliczna, przedstawiona na Rys. II.6 (str. 72), która następnie była dopasowywana na podstawie modeli struktury (np. Rys. II.27, str. 116), nie jest chyba tą składową z Rys. II.5 ?

(iii) jakie czynniki zadecydowały o wyborze zastosowanych w pracy trzech algorytmów rojowych, spośród szeregu innych tego typu algorytmów ? Czy Doktorant próbował stosować inne, lecz negatywne doświadczenia zadecydowały o wyborze algorytmu ptasiego (PSO), świetlika (FA) i kryla (KHA) ?

(iv) Autor posługuje się w pracy bardzo wielu skrótami. Pomimo tego, że pełna nazwa, którą obejmuje skrót, jest przytaczana w chwili jej pojawienia się w tekście pracy, recenzent uważa, że powinien zostać sporządzony spis stosowanych skrótów.

### Wniosek końcowy.

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska mgr inż. Tomasza Kozika pt. „*Modeling of the structure of molecular and macromolecular systems using molecular dynamics and artificial intelligence as complementary methods*” została wykonana dużym nakładem pracy i stanowi oryginalne rozwiązania podjętych problemów naukowych. Wykazuje wysokie opanowanie przez Doktoranta teorii naukowej, metod badań i literatury przedmiotu. Wykonane w pracy obliczenia i symulacje przynoszą wiele nowych faktów i wzbogacają dotychczasową wiedzę o nowy udokładniony model struktury układu polimerowego PANI/CSA oraz układów polimerowych wytworzonych w oparciu o domieszkowanie poli(3,4-etylenodioksytiofenu) PEDOT. Wnoszą także znaczący wkład w lepsze zrozumienie procesów formowania i modyfikacji własności cienkich wielowarstwowych układów polimerowych, zawierających monowarstwy organiczne typu SAM. W szczególności wartościowym rezultatem pracy jest opracowanie oryginalnej metodologii rozszyfrowywania struktur krystalicznych polimerów w oparciu o połączenie metody dynamiki molekularnej z wykorzystaniem, w celach optymalizacyjnych, algorytmów rojowych sztucznej inteligencji. Powstały w wyniku tego program komputerowy PolyAna stanowi praktyczny aspekt wykonanej pracy. Zwraca uwagę bardzo staranne przygotowanie pracy pod względem edytorskim i graficznym.



W konkluzji, stwierdzam, że recenzowana praca spełnia wszelkie wymogi stawiane rozprawom doktorskim w ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym i przedkładam Radzie Wydziału Fizyki i Informatyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie wniosek o dopuszczenie mgr inż. Tomasza Kozika do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Wniosek o wyróżnienie pracy doktorskiej.

Rozprawa doktorska mgr inż. Tomasza Kozika stanowi wzorowy przykład pracy naukowej realizowanej w ramach owocnej współpracy z wybitnymi specjalistami własnej grupy badawczej, a także specjalistami zagranicznymi. W rezultacie uzyskane wyniki charakteryzują się wysokimi walorami poznawczymi, były przedmiotem publikacji w renomowanych czasopiśmie o najwyższym prestiżu naukowym: *Polymer, Macromolecular Theory and Simulations*, a także były prezentowane na ważnych konferencjach międzynarodowych. Wnioskuje o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr inż. Tomasza Kozika.

27.12.2019r. Slusarovich