



Poznań, dnia 05.01.2026

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. inż. Joachima Eichenlauba
pt. „Wykorzystanie modelowania QSPR w celu przewidywania właściwości
fizykochemicznych cieczy jonowych”

Promotor: prof. dr hab. inż. Adam Kloskowski

Recenzja została sporządzona na podstawie pisma Pana Przewodniczącego Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Politechniki Gdańskiej, dr. hab. inż. Marka Tobiszewskiego, prof. uczelni, znak L. Dz. 295 WCh/Dz/2025, z dnia 24 października 2025 r., powołującego się na uchwałę Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Politechniki Gdańskiej z dnia 14 października 2025 r. w sprawie wyznaczenia recenzentów w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne Panu mgr. inż. Joachimowi Eichenlaubowi.

WSTĘP

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska pt. „*Wykorzystanie modelowania QSPR w celu przewidywania właściwości fizykochemicznych cieczy jonowych*” została wykonana pod promotorską opieką Pana prof. dr. hab. inż. Adama Kloskowskiego w Katedrze Chemii Fizycznej Wydziału Chemicznego Politechniki Gdańskiej.

Rozprawa doktorska dotyczy zastosowania modelowania QSPR (ang. *Quantitative Structure - Property Relationship*) do określenia potencjału rozpuszczania ditlenku węgla w cieczach jonowych. Zakres badań obejmował opracowanie modelu QSPR umożliwiającego przewidywanie wartości stałej Henry’ego ditlenku węgla w cieczach jonowych, analizę wpływu wolnej objętości cieczy jonowych na proces absorpcji ditlenku węgla oraz ocenę wpływu zmian środowiska obliczeniowego i metod optymalizacji struktur cieczy jonowych na uzyskiwane modele QSPR.

Modele ilościowej zależności struktura - aktywność (QSAR) oraz struktura - właściwości (QSPR) umożliwiają przewidywanie aktywności biologicznej i właściwości molekularnych na podstawie korelacji numerycznych między strukturami chemicznymi a obserwowanymi wartościami tych parametrów. Wykorzystanie modelowania pożądanych cech badanych

układów znacząco usprawnia proces ich identyfikacji i jest zgodne z globalnymi trendami w zakresie racjonalnego zarządzania zasobami. Takie podejście pozwala ograniczyć liczbę nowo syntezowanych związków, a także skraca czas i zmniejsza koszty związane z prowadzeniem eksperymentów.

Tematyka rozprawy doktorskiej dotyczy zagadnień związanych z modelowaniem rozpuszczalności ditlenku węgla w cieczach jonowych. Zainteresowanie tym obszarem badań wynika z rosnącej potrzeby ograniczania emisji gazów cieplarnianych oraz poszukiwania efektywnych i selektywnych materiałów sorpcyjnych, które mogłyby znaleźć zastosowanie w technologiach wychwytu i separacji CO₂. Ciecze jonowe stanowią klasę związków o unikalnych właściwościach fizykochemicznych, w tym niskiej lotności, wysokiej stabilności termicznej i chemicznej oraz szerokim zakresie polarności i lepkości. Kluczową cechą tych związków jest projektowalność, czyli dobór odpowiedniego kationu i anionu w strukturze, co pozwala na otrzymanie mediów o specyficznych właściwościach, dostosowanych do określonych zastosowań technologicznych, takich jak m.in. kataliza, magazynowanie energii czy tworzenie materiałów funkcjonalnych.

Zakres pracy doktorskiej mgr. inż. Joachima Eichenlauba jest w pełni zgodny z powyższymi kierunkami badań. Praca przyczynia się do pogłębienia wiedzy na temat zależności struktura - właściwości w cieczach jonowych, a także dostarcza wartościowych narzędzi predykcyjnych umożliwiających projektowanie nowych związków o określonych właściwościach fizykochemicznych, co ma istotne znaczenie zarówno dla badań podstawowych, jak i potencjalnych zastosowań technologicznych.

Recenzowana praca doktorska, zgodnie z literaturą przedmiotu, charakteryzuje się zarówno nowatorskim charakterem, jak i oryginalnością. Efektem zaangażowania badawczego Doktoranta jest współautorstwo 4 artykułów z listy JCR (*Separation and Purification Technology, Journal of Molecular Liquids, International Journal of Molecular Sciences, Molecules*), co stanowi istotny dowód na wysoką jakość prowadzonych badań oraz rozpoznawalność w środowisku naukowym.

OPINIA MERYTORYCZNA

Układ rozprawy doktorskiej jest tradycyjny, obejmuje 141 stron (w tym 36 stron zawierających *Spis treści, Wykaz najważniejszych oznaczeń i skrótów, Bibliografię, Dorobek naukowy, Spis ilustracji i tabel, Materiały uzupełniające*), które zostały podzielone na następujące rozdziały: *Wprowadzenie, Cele i tezy pracy, Metody badawcze, Wyniki, Wnioski, Podsumowanie*. Praca zachowuje odpowiednią proporcję części poświęconej badaniom własnym w stosunku do całości opracowania. Bibliografia zawiera 249 pozycji światowej literatury, w większości anglojęzycznych. Źródła literaturowe zostały dobrane w sposób zapewniający merytoryczne wsparcie dla działań naukowo-badawczych realizowanych przez Doktoranta.

W części teoretycznej pracy Autor przedstawił informacje na temat cieczy jonowych (historia badań nad cieczami jonowych, ciecze jonowe w przemyśle, zależności wybranych właściwości fizykochemicznych cieczy jonowych od ich budowy) oraz modelowania QSPR. Doktorant opisał w sposób wyczerpujący metody optymalizacji struktury, zdefiniował deskryptory

molekularne oraz przedstawił tabelaryczne zestawienie modelowania QSPR w celu przewidywania właściwości fizykochemicznych cieczy jonowych (informacje o modelowanej właściwości, rozmiarze zbiorów danych oraz zastosowanych metodach modelowania).

Fragment przeglądu literaturowego traktuje także o rozpuszczalności gazów, zielonych rozpuszczalnikach, ditlenku węgla jako gazie cieplarnianym oraz o wolnej objętości w cieczach jonowych.

Badania przedstawione w pracy doktorskiej dotyczyły modelowania stałej Henry'ego, oceny wpływu frakcyjnej wolnej objętości (FFV) oraz analizy sposobów optymalizacji cząsteczek. Etap pierwszy obejmował budowę trzech modeli i identyfikację kluczowych deskryptorów molekularnych wpływających na absorpcję CO₂. W drugim etapie skoncentrowano się na FFV, obliczono ją dla 73 cieczy jonowych i sprawdzono, czy jej uwzględnienie poprawia jakość modeli QSPR. Trzeci etap dotyczył wpływu różnych metod optymalizacji cząsteczek na wyniki modelowania. W mojej ocenie wszystkie te działania zostały logicznie powiązane i zaplanowane.

W rozdziale *Metody badawcze* Autor szczegółowo przedstawił kolejne etapy przygotowania danych, optymalizacji struktur oraz obliczania deskryptorów molekularnych, w tym także sposób ograniczania liczby niezależnych zmiennych wykorzystywanych w modelowaniu. Opis obejmował również procedurę podziału zbioru danych, proces modelowania QSPR oraz metody walidacji uzyskanych modeli.

W rozdziale *Wyniki* Doktorant opisał rezultaty modelowania stałej Henry'ego, walidacji modeli oraz analiz deskryptorów i wolnej objętości cieczy jonowych. Materiał został starannie przygotowany i potwierdził realizację założonych celów badawczych.

Podsumowując, do najważniejszych osiągnięć recenzowanej rozprawy należą:

1. uwzględnienie wolnej objętości cieczy jonowych jako parametru wpływającego na proces rozpuszczania ditlenku węgla, analiza tego czynnika umożliwia pogłębienie interpretacji mechanizmów rozpuszczania gazów w cieczach jonowych oraz ocenę jego znaczenia w kontekście modelowania QSPR;
2. wykazanie, że wolna objętość cieczy jonowych jest determinowana głównie przez strukturę kationu, a jej uwzględnienie w modelowaniu QSPR umożliwia dokładniejszą analizę wpływu anionu na rozpuszczalność ditlenku węgla;
3. stwierdzenie, że trójwymiarowe deskryptory molekularne wykazują wrażliwość na zastosowaną metodę optymalizacji struktur cieczy jonowych, jednak obserwowane zmiany zachowują spójne trendy, co skutkuje nieznacznym wpływem na parametry otrzymanych modeli QSPR.

Przedmiotowa problematyka badawcza, podjęta w pracy doktorskiej, charakteryzuje się wyraźnym interdyscyplinarnym podejściem, łączącym zagadnienia z zakresu chemii fizycznej, chemii teoretycznej oraz metod obliczeniowych. Takie ujęcie umożliwia całościowe spojrzenie na analizowane procesy oraz zastosowanie zróżnicowanych narzędzi badawczych w celu uzyskania obiektywnych i wiarygodnych rezultatów. Uzyskane wyniki wskazują na ich potencjalną przydatność w dalszych badaniach nad projektowaniem cieczy jonowych o określonych właściwościach sorpcyjnych. Zidentyfikowane powiązania pomiędzy strukturą

cząsteczek a ich właściwościami mogą stanowić podstawę dla opracowania nowych związków chemicznych dedykowanych specyficznym zastosowaniom, w szczególności w kontekście efektywnej sorpcji gazów.

Podczas lektury pracy doktorskiej zwróciłam uwagę na kilka zagadnień, które mogą stanowić interesujący punkt wyjścia do dyskusji w trakcie obrony:

1. *Wprowadzenie* zapoznaje czytelnika z tematyką rozprawy, odwołując się m.in. do badań nad cieczami jonowymi. W tym miejscu można polemizować z niektórymi tezami przedstawionymi przez Autora, przykładowo:
 - *Napięcie powierzchniowe jest zależne od długości łańcucha alkilowego przy kationie i maleje wraz ze wzrostem jego długości aż do osiągnięcia plateau przy 6-8 atomach węgla* (str. 18),
 - *(...) ciecze [jonowe] są w większości przypadków toksyczne, a także drogie i słabo dostępne* (str. 35).W związku z powyższym wskazane jest, aby Doktorant doprecyzował te sformułowania, uwzględniając aktualny stan wiedzy i literaturę przedmiotu.
2. Cele pracy doktorskiej zostały jasno określone, jednakże nie przedstawiono hipotezy badawczej. Uzupełnienie tego elementu pozwoliłoby na jednoznaczne powiązanie celów pracy z przyjętą metodologią oraz interpretacją uzyskanych wyników, wzmacniając tym samym spójność i czytelność całego opracowania. Czy Doktorant mógłby rozważyć jej sformułowanie podczas obrony?
3. W przyszłości Autor planuje wykorzystać zgromadzoną wiedzę na temat modelowania QSPR oraz cieczy jonowych, koncentrując się na badaniu i modelowaniu ich toksyczności wobec bakterii występujących w jamie ustnej oraz na analizie możliwości wykorzystania tych związków jako środków bakteriobójczych lub bakteriostatycznych w materiałach stomatologicznych. W związku z tym zasadne jest postawienie pytania: jakie jest praktyczne znaczenie uzyskanych rezultatów dla projektowania cieczy jonowych o określonych właściwościach fizykochemicznych, wykraczających poza zdolność sorpcji gazów?

Rozprawa doktorska została przygotowana poprawnie, niemniej w tekście Doktorant nie ustrzegł się drobnych usterek redakcyjnych czy niezręczności językowych, przykładowo: str. 10 *temperaturze* – powinno być *temperatury*; str. 11 jest *204* zamiast *2004*, str. 12 i 13 *Zasady Zielonej Chemii* – w tekście ciągłym powinno być *zasady zielonej chemii* (małe litery), str. 16 *kwas siarkowy (VI)* - liczbę utlenienia należy podawać w nawiasie bezpośrednio po nazwie związku, bez spacji przed nawiasem, str. 20 *komercyjnych dostępnych komercyjnie*, w tekście występują sieroty typograficzne (jednoliterowe spójniki i przyimki na końcu wiersza), tytuły tabel zostały umieszczone pod tabelą (z wyjątkiem rozdziału *Materiały uzupełniające*) - tytuły powinny znajdować się nad tabelą.

Wskazane nieprawidłowości nie wpływają na mój bardzo pozytywny odbiór recenzowanej rozprawy doktorskiej. Materiał badawczy był obszerny, a Autor wykazał duże zaangażowanie w jego opracowanie i prezentację, dbając o możliwie najbardziej czytelne przedstawienie zarówno zastosowanej metodyki, jak i uzyskanych wyników. Niektóre elementy tekstu

mogłyby zostać poddane niewielkim korektom w celu zwiększenia jego przejrzystości. Warto jednak podkreślić, że powyższe uwagi mają wyłącznie charakter edytorsko-redakcyjny i nie wpływają na ocenę wartości merytorycznej pracy.

Recenzowana praca doktorska wymagała od Doktoranta nie tylko bardzo gruntownej wiedzy z zakresu chemii fizycznej czy chemii teoretycznej, ale i metod obliczeniowych. W wyniku przeprowadzonych badań opracowano model QSPR o charakterze predykcyjnym, a analiza deskryptorów molekularnych pozwoliła na identyfikację cech strukturalnych cieczy jonowych istotnych z punktu widzenia rozpuszczalności CO₂. Mgr inż. Joachim Eichenlaub konsekwentnie zrealizował wyraźnie określone cele badawcze. Doktorant umiejętnie dobrał metody badawcze, narzędzia do analizy danych oraz sprawnie zaprezentował wyniki swoich badań. Wysoko oceniam jego zdolność do krytycznego analizowania wyników, co świadczy o dużej dojrzałości naukowej.

WNIOSEK KOŃCOWY

W podsumowaniu stwierdzam, że recenzowana rozprawa doktorska mgr. inż. Joachima Eichenlauba pt. *„Wykorzystanie modelowania QSPR w celu przewidywania właściwości fizykochemicznych cieczy jonowych”* spełnia wszystkie warunki określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.). Wniosuję zatem do Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Politechniki Gdańskiej o dopuszczenie mgr. inż. Joachima Eichenlauba do dalszych etapów przewodu doktorskiego.