POLSKA AKADEMIA NAUK
CENTRUM BADAŃ MOLEKULARNYCH I MAKROMOLEKULARNYCH
W ŁODZI
PRACOWNIA MAGNETYCZNEGO REZONANSU JĄDROWEGO
90-363 ŁÓDŹ; Ul. SIENKIEWICZA 112
TEL (0-42) 68 03 240
FAX (0-42) 684-71-26
E-MAIL; marekpot@cbmm.lodz.pl

POLISH ACADEMY OF SCIENCES
CENTRE of MOLECULAR and MACROMOLECULAR STUDIES
NMR LABORATORY
90-363 ŁÓDŹ;
SIENKIEWICZA 112 POLAND
TEL (0-42) 68 03 240
FAX (0-42) 684-71-26
E-MAIL; marekpot@cbmm.lodz.pl

5 marca, 2019.

Prof. dr hab. Marek J. Potrzebowski

# Opinia dotycząca wniosku o nadanie tytułu naukowego profesora.

| | |
|---|---|
| *1) Imię i nazwisko kandydata;* | Teobald Kupka |
| *2) data uzyskania stopnia doktora hab.;* | 2011 |
| *3) nazwa Rady Naukowej, która przeprowadziła przewód habilitacyjny;* | Rada Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego |
| *4) nazwa Rady Naukowej, która przedstawiła wniosek o nadanie tytułu profesora;* | Rada Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego |

## Ocena wniosku

Uważam, że dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny dr hab. Teobalda Kupki, spełnia kryteria formalne i merytoryczne wymagane przy nadaniu tytułu profesora, określone Ustawą o stopniach i tytule naukowym z dnia 14 marca 2003 r. (Dz. U. z 2017, poz 1789) oraz Rozporządzeniem MNiSzW z dnia 19 stycznia 2018.

## Uzasadnienie

*i) Osiągnięcia naukowe.*

Dr hab. Teobald Kupka swoją pierwszą pracę po ukończeniu chemicznych studiów magisterskich rozpoczął w roku 1980 na stanowisku technicznym w Instytucie Chemii Uniwersytetu Śląskiego (UŚl) wchodzącego w skład Wydziału Matematyki-Fizyki i Chemii. Jego opiekunem naukowym był doktor habilitowany Jan Olgierd Dzięgielewski. Od początku kariery zawodowej jego zainteresowania były związane ze spektroskopią magnetycznego rezonansu jądrowego (MRJ). W roku 1992 roku obronił pracę doktorską zatytułowaną *„Struktura kompleksów Mn(II), Co(II) i Cu(II) z*

*niektórymi penicylinami w roztworach określane metodą MRJ z zastosowaniem polepszania parametrów widma metodą komputerową"* której promotorem był profesor Dzięgielewski. Praca ta została wyróżniona nagrodą Rektora Uniwersytetu Śląskiego. Po uzyskaniu stopnia doktora, lata 1998-2006 dr hab. Kupka spędził w różnych laboratoriach poza Polską, rozpoczynając swe peregrynacje naukowe od University of Waterloo, Department of Physics, Ontario, Canada (1998-2000) gdzie zatrudniony był na pozycji "post-doc". Kolejnym etapem było zatrudnienie w Argonne National Laboratory, Chicago, Illinois, USA (2000-2005) na stanowisku "Visiting Professor". Lata 2005-2006 to pobyt w Institute of Biomedical Studies, Academia Sinica, Taipei, Tajwan również na stanowisku Visiting Profesor. Wszystkie te pobyty w mniejszym lub większym stopniu były dedykowane poznawaniu nowych technik obliczeniowych i wzbogacaniu warsztatu w obszarze chemii komputerowej. Po powrocie do Polski dr hab. Kupka podjął pracę na Uniwersytecie Opolskim. W roku 2011 zdecydował się na złożenie rozprawy habilitacyjnej pt. *„Obliczenia teoretyczne ekranowania magnetycznego, przesunięć chemicznych oraz stałych sprzężeń spinowo-spinowych w granicy bazy funkcyjnej"* powstałej w oparciu o cykl 12 monotematycznych prac naukowych. Kolokwium habilitacyjne zostało przeprowadzone przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego i w wyniku pozytywnej decyzji Rady otrzymał stopień doktora habilitowanego nauk chemicznych w zakresie chemii fizycznej i teoretycznej. Istotnym elementam i znaczącym osiągnięciem naukowym w omawianej dysertacji była propozycja i wszechstronna weryfikacja teoretycznej procedury prowadzącej do wyznaczania dokładnych parametrów MRJ w granicy bazy funkcyjnej.

Po uzyskaniu stopnia dra habilitowanego, będąc pracownikiem Zakładu Chemii Fizycznej i Modelowania Molekularnego Wydziału Chemii, Uniwersytetu Opolskiego dr hab. Kupka poszerzał swe kompetencje i rozwijał zainteresowania związane z zastosowaniami metod obliczeniowych do modelowania molekularnego oraz sposobu szacowania dokładnych parametrów spektroskopowych i strukturalnych w granicy bazy zupełnej (CBS). Szczególnie wartościowe wydają się prace teoretyczne związane z nowymi materiałami węglowymi uwzględniające szacowanie harmonicznych i anharmonicznych częstości drgań molekuł w granicy bazy zupełnej oraz systematyczne podejście do analizy uporządkowanych nanostruktur. Przechodząc od prostych układów zbudowych z jednostek benzenowych (liniowe i cykliczne aceny) dr hab. Kupka skonstruował modele pozwalające badać procesy fizykochemiczne w złożonych modelach jakimi są nanorurki węglowe. Z uwagi na stopień skomplikowania badanych układów i optymalizując relację pomiędzy nakładem pracy a uzyskanym efektem dr hab. Kupka, do przewidywania właściwości strukturalnych, elektronowych (HOMO/LUMO i przerwy energetycznej) w swych obliczaniach wprowadził empirycznie opis analogiczny do CBS. Weryfikacją takiego podejścia było porównanie zmian długości wiązań C=C dla dostępnych w literaturze acenów oraz drgania „oddychającego" RBM obserwowanego w widmach Ramana

jednościennych nanorurek węglowych. Wyniki badań zostały opublikowane w Journal of Chemical Theory and Computation (IF = 5.3), jednym z najbardziej przestiżowych czasopism w dziedzinie obliczeń teoretycznych. Zaproponowane rozwiązania metodologiczne umożliwiły bardzo dokładne i szybkie przewidywanie wartości tensora ekranowania magnetycznego fulerenów C60 i C76. Istotnym osiągnięciem dra hab. Kupki będącym kontynuacją zainteresowań związanych z badaniem materiałów węglowych były prace wykorzystujace gazy szlachetne jako sondy pomiarowe służące do charakterystki fulerenów. W projektach tych elementem kluczowym była wrażliwość gazów szlachetnych posiadających magnetycznie czynne izotopy, na obecność elektronów π oraz indukowane przez nie prądy kołowe i pole magnetyczne. Analiza niebezpośrednich oddziaływań "przez przestrzeń" umożliwiła wyznaczenie położenia sygnału w widmie MRJ i skorelowanie parametrów ekranowania z parametrami geometrycznymi. Szczególnie w przypadku izotopu hel-3 uzyskano dobrą zgodność teoretycznego położenia sygnału z widmami doświadczalnymi fulerenów. Cięższe gazy szlachetne (np. Xe-129) nie dawały już tak spektakularnych rozwiązań i wymagały wprowadzenia poprawki relatywistycznej przy pomocy uproszczonego modelu spin- orbita ZORA oraz dokładniejszego modelu czteroskładnikowego. Wśród aktualnie prowadzonych badań naukowych warto zasygnalizować prace związane z poznaniem istoty aromatyczności związków organicznych głównie poprzez wyznaczanie tzw. magnetycznych indeksów aromatyczności (NICS). Celem tych prac jest lepsze zrozumienie możliwości tworzenia kompozytów grafenu płatkowego, w tym domieszkowanego borem i azotem, z metaloftalocyjaninami jako potencjalnymi fotouczulaczami w docelowej (kierowanej) terapii PDT.

Zwykle przy analizie wniosków profesorskich w dziedzinie nauk ścisłych ocenia się parametry bibliometryczne kandydata, oddziaływanie jego twórczości na środowisko naukowe, rozpoznawalność krajową i miedzynarodową. W przypadku dra hab. T. Kupki te elementy oceny nie budzą zastrzeżeń. Jest autorem lub współautorem ok. 90 publikacji jakie ukazały się w czasopismach z listy JCR (Journal Citation Record), prace te były cytowane ponad 1200 razy, indeks Hirscha wynosi 23. Najczęściej cytowane prace to;

1) S. K. Gray*, **T. Kupka**, Propagation of Light in Metallic Nanowire Arrays: Finite-Difference Time-Domain Studies of Silver Cylinders. *Physical Review B, 68 (2003) 454151-4541511. IF = 2,962,* Liczba Cytowań = 215.

2) **T. Kupka***, M. Stachów, M. Nieradka, J. Kaminsky* and T. Pluta; Convergence of Nuclear Magnetic Shieldings in the Kohn–Sham Limit for Several Small Molecules *J. Chem. Theory Comput.*, ***2010***, 6 *(5), pp 1580–1589, IF = 5.31* , Liczba Cytowań = 72.

Z drugiej zaś strony, z pewnym niepokojem należy odnotować fakt, ze najnowsze prace dra hab. T. Kupki lokowane są w mniej prestiżowych czasopismach, głównie drugiego i trzeciego kwartylu.

*ii) Osiągnięcia dydaktyczne.*

Mimo że kariera naukowa dr hab. Kupki obejmuje okres blisko czterech dekad to z uwagi na liczne zmiany miejsca pracy i funkcje jakie pełnił w laboratoriach zagranicznych, które dotyczyły głównie prowadzenia badań naukowych, jego osiągnięcia dydaktyczne nie są bardzo rozbudowane i dotyczą głównie zatrudnienia w Polsce w latach 2006-2018. W tym okresie dr hab Kupka był opiekunem pięciu prac licencjackich na Uniwersytecie Opolskim i dwóch na Uniwersytecie Śląskim. Sprawował równiez funkcję promotora w pięcu pracach magisterskich wykonanych na Wydziale Chemii Uniwersytetu Opolskiego. Był promotorem w trzech przewodach doktorskich. Wszystkie te prace zostały wykonane na Uniwersytecie Opolskim. Aktualnie jest promotorem jednego przewodu, otwartego w roku 2018-tym. Był recenzentem trzech prac doktorskich. Dwie spośród nich przeprowadzone były na Politechnice Wrocławskiej, jedna na Ukrainie w Zaporizhzhya State Medical University, Ministry of Health of Ukraine, Zaporizhzhya. Był również członkiem komisji habilitacyjnej powołanej przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego (dr Alicja Utraty-Wesołek z Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN w Zabrzu *„Biokompatybilne warstwy polimerowe o kontrolowanym powinowactwie do wody. Synteza i zastosowanie"*).

Dr hab. T. Kupka uczestniczy w prowadzeniu zajęć dydaktycznych. Lista różnego typu aktywności obejmuje ponad trzydzieści pozycji. Wśród aktualnych zadań dydaktycznych warto wymienić wykłady i laboratoria dedykowane biologii eksperymentalnej (podstawy modelowania molekularnego biocząsteczek), konwersatoria (podstawy chemii kwantowej i teoretycznej oraz spektroskopia) czy wykłady i laboratoria z komputerowej analizy struktur DNA i białek. Jest równiez aktywnym popularyzatorem nauki. Wielokrotnie brał udział w Festiwalu Nauki w Opolu (wykłady, prezentacje i spotkania promujące modelowanie molekularne, nanotechnologię, spektroskopię MRJ oraz znaczenie pracy zespołowej i współpracy międzynarodowej w nauce). We współpracy z Uniwersytetem Śląskim w Katowicach współorganizował wyjazdy studentów fizyki medycznej wraz z ich promotorami ze strony uniwersytetu oraz szpitali i Śląskiej Akademii Medycznej w celu próbnej prezentacji prac dyplomowych na miesiąc przed obroną. Jest też propagatorem wiedzy na temat kultury i nauki krajów Wschodu. Wydaje się, że szczególnie bliskie są mu Chiny i Tajwan, o czym mogą świadczyć tytuły wygłoszonych w ostatnim okresie wykładów („Kolorowy świat Tajwanu", „Tajwan i Chiny", Nowy Rok Chiński").

*iii) Osiągnięcia organizacyjne.*

Z materiałów załączonych do wniosku profesorskiego wynika, że zaangażowanie w sprawy organizacyjne, działalność na rzecz wspólnego dobra społeczności naukowej dr hab. T. Kupka traktuje równie poważnie jak indywidualny rozwój naukowy. Uczestniczył w organizacji wielu przedsięwzięć o charakterze krajowym i międzynarodowym. Był inicjatorem, współorganizatorem i współprzewodniczącym polsko-tajwańskich konferencji „From molecular modeling to nano- and biotechnology", które odbywają się cyklicznie od roku 2014-go. Czwarta w cyklu konferencja odbyła się w Opolu w sierpniu 2018 roku. Współorganizował i współprzewodniczącył konferencji 3rd Symposium on weak molecular interactions, (wraz z prof. S. Kunsagi-Mate z University of Pecs, Hungary), Opole marzec 2017.

Jest bardzo aktywny i skuteczny w nawiązywaniu współprac międzynarodowych. Lista instytucji, z kórymi łączą go wspólne projekty obejmuje kilkanaście pozycji, wsród nich:

- współpraca naukowa z zespołem prof. Anne-Marie Kelterer, Graz University of Technology, Graz, Austria w ramach grantu Austria-Polska OAD (od 2016r).

- współpraca naukowa i wymiana osobowa pomiędzy Politechniką Lwowską (od roku 2015, Lwów, Ukraina, kierownik zespołu prof. Vladimir Novikov) oraz Uniwersytetem Opolskim.

- wspólne badania naukowe w zakresie modelowania molekularnego z zespołem z Czeskiej Akademii Nauk w Pradze (od 2009), Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Academy of Sciences of the Czech Republic.

- wspólne badania naukowe w zakresie modelowania molekularnego, prof. Jacob Kongsted (Department of Physics, Chemistry and Pharmacy, University of Southern Odense, Denmark, współpraca od 2011).

- wspólne badania naukowe w zakresie modelowania molekularnego, prof. Stephan P. A. Sauer (od 2010, Department of Chemistry, University of Copenhagen).

- współpraca naukowa i organizacyjna z zespołem prof. Hong-Ming Lin (Tatung University, Taipei, Tajwan).

W ostatnim okresie dr hab. T. Kupka podjął współpracę z chińskimi badaczami z Wuhan University (Chiny) i Tatung University (Taiwan). Celem projektu są badania eksperymentalne i teoretyczne selenu z wykorzystaniem techniki MRJ. Prace te mają związek z nawożeniem gleb prostymi związkami nieorganicznymi na terenach ubogich w mikroelementy selenowe.

**Podsumowanie.**

W podsumowaniu pragnę stwierdzić, że przedstawiony do oceny materiał w sprawie o nadanie tytułu naukowego profesora nauk chemicznych dla dr hab. Teobalda Kupki w moim odczuciu jest wnioskiem dobrze umotywowanym. Wszystkie elementy brane zwykle pod uwagę przy ocenie kandydatury (pozycja międzynarodowa, wkład do nauki światowej, innowacyjność opublikowanych prac) nie budzą wątpliwości. Jedyne uczucie niedosytu jakie towarzyszyło mi podczas analizy wniosku związane jest z brakiem sukcesów w pozyskiwaniu środków na prowadzenie badań, uzyskanych w drodze otwartego konkursu międzynarodowego lub krajowego. W wymiarze krajowym, takie agendy jak NCN, NCBiR czy FNP finansują projekty i umożliwiają budowę zespołów naukowych. Z załączonych materiałów nie wynika czy dr hab. T. Kupka nie składał aplikacji czy składał i nie uzyskał finansowania. Bez względu na to, która z tych odpowiedzi jest prawidłowa element ten powinienien być źródłem poważnej refleksji wyznaczającej kierunek przyszłych działań i starań. Mimo tych drobnych wątpliwości wniosek Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Opolskiego o nadanie tytułu profesora nauk chemicznych dla dr hab. Teobalda Kupki w pełni popieram.