



RECENZJA
pracy doktorskiej Pana mgr inż. Krzysztofa Pawełka
pt. "Opis zjawisk transportu masy w kanałach wybranych
membran naturalnych i syntetycznych".

Przedstawiona do recenzji praca doktorska Pana mgr inż. Krzysztofa Pawełka obejmuje tematykę opisu matematycznego i symulacji transportu masy w kanałach wybranych membran naturalnych (błony komórkowe) oraz polimerowych (syntetycznych i sztucznych) o własnościach magnetycznych. Praca ma charakter teoretyczno-doświadczalny i stanowi fragment badań nad transportem membranowym prowadzonych od wielu lat w Katedrze Fizykochemii i Technologii Polimerów pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Zbigniewa J. Grzywiny.

Przedstawiona dysertacja składa się z celu pracy, wstępu, trzech głównych rozdziałów, podsumowania oraz wykazu cytowanej literatury. Zamieszczono również wykaz opublikowanych prac, których współautorem jest mgr Pawełek (cztery prace o łącznym IF=11,083).

Pierwszy rozdział pracy to krótki wstęp do procesów membranowych, który nadaje pewien klimat dalszej części dysertacji. Szczegółowe studia literaturowe są przedmiotem rozdziału drugiego. Doktorant analizuje tutaj mikroskopowy obraz dyfuzji, czyli błędzenia przypadkowe z dryfem i bez niego, konkludując swoje rozważania równaniami Ficka i Smoluchowskiego. Istotę transportu masy (jonów) przez membrany biologiczne omawia w kontekście łańcuchów Markowa tj. realizacji procesów Markowa na dyskretnej przestrzeni stanów. Omawia się tu szczególnie własności absorpcyjnych, skończonych łańcuchów Markowa, macierzy przejść między stanami oraz ich ewolucję, co będzie bezpośrednio wykorzystywane w części badawczej przedstawionej pracy. W dalszej części tego rozdziału Autor omawia naturę kanałów jonowych oraz metody doświadczalne badania przepływających przez nie prądów jonowych. Wykazuje się tu sporą wiedzą i erudycją. Kolejno omawia koncepcje rozdziału powietrza przez membrany magnetyczne, idee

molekularnego pola magnetycznego Weissa, kanałów magnetycznych oraz zjawiska agregacji składników powietrza.

Rozdział trzeci poświęcony jest omówieniu technik pomiarowych badania transportu przez membrany naturalne i syntetyczne oraz metod symulacyjnych adresowanych zarówno do membran naturalnych jak i syntetycznych. Doktorant nie wykonywał doświadczeń osobiście. Zajmował się opisem matematycznym oraz symulacjami.

W rozdziale czwartym mgr inż. Krzysztof Pawełek opisuje badania własne. Z ilości stron poświęconych badaniom nad transportem jonów potasowych przez kanały białkowe (35 stron) wynika jasno, że to był główny obszar zainteresowań Doktoranta. Membranom magnetycznym poświęcono tylko 13 stron. Modelowanie przewodnictwa jonów potasowych przez filtr selektywny kanału KcsA (wszystkie kanały białkowe mają swoje symbole) zostało wykonane we współpracy z prof. Johnem Kozakiem z Uniwersytetu Chicagowskiego.

Profesor Kozak udostępnił dane doświadczalne, które z kolei uzyskał od prof. Rodericka Mackinnona, noblisty z Uniwersytetu Rockefellera w Nowym Jorku. Ta informacja jest ważna, bo właśnie prof. Mckinnon wykonał badania strukturalne skryształizowanego kanału potasowego i odtąd wiadomo jakie elementy strukturalne trzeba wziąć pod uwagę w realistycznym modelowaniu transportu jonów potasu przez ten kanał. Chodzi tutaj o „filtr selektywny” tj. krótki i wąski element kanału białkowego determinujący kinetykę transportu. Model transportu jonów potasu przez ten filtr, oparty o teorię procesów Markowa, został szczegółowo opisany w pracy z prof. Kozakiem opublikowanej w prestiżowym czasopiśmie *Physica A* w 2010 roku.

Drugim kanałem opisanym w recenzowanej pracy jest kanał typu BK, który nie posiada filtra selektywnego mając w zamian – „bramkę” tzn. miejsce w kanale, które pod wpływem zmian napięcia otwiera się lub zamyka. Ten proces nazywa się kolokwialnie „bramkowaniem”. Nowym podejściem w modelowaniu działania kanałów BK jest opisana w pracy analiza pamięci dalekozasięgowej Hursta, której współautorem jest mgr Pawełek. Kolejnym, zasadniczym problemem podjętym w recenzowanej pracy było modelowanie wzbogacania powietrza w tlen przy pomocy membran magnetycznych techniką Monte Carlo. Wyniki tych badań wskazują jednoznacznie, że im mniejsza granulacja proszku magnetycznego i im większa wartość pola magnetycznego tym większe wzbogacenie powietrza (do 95 %). Są to ważne wskazania praktyczne.

Na zakończenie chciałbym wskazać na pewne drobne mankamenty i wątpliwości, które mam po przeczytaniu tej, niewątpliwie interesującej, pracy:

molekularnego pola magnetycznego Weissa, kanałów magnetycznych oraz zjawiska agregacji składników powietrza.

Rozdział trzeci poświęcony jest omówieniu technik pomiarowych badania transportu przez membrany naturalne i syntetyczne oraz metod symulacyjnych adresowanych zarówno do membran naturalnych jak i syntetycznych. Doktorant nie wykonywał doświadczeń osobiście. Zajmował się opisem matematycznym oraz symulacjami.

W rozdziale czwartym mgr inż. Krzysztof Pawełek opisuje badania własne. Z ilości stron poświęconych badaniom nad transportem jonów potasowych przez kanały białkowe (35 stron) wynika jasno, że to był główny obszar zainteresowań Doktoranta. Membranom magnetycznym poświęcono tylko 13 stron. Modelowanie przewodnictwa jonów potasowych przez filtr selektywny kanału KcsA (wszystkie kanały białkowe mają swoje symbole) zostało wykonane we współpracy z prof. Johnem Kozakiem z Uniwersytetu Chicagowskiego.

Profesor Kozak udostępnił dane doświadczalne, które z kolei uzyskał od prof. Rodericka Mackinnona, noblisty z Uniwersytetu Rockefellera w Nowym Jorku. Ta informacja jest ważna, bo właśnie prof. Mckinnon wykonał badania strukturalne skryształowanego kanału potasowego i odtąd wiadomo jakie elementy strukturalne trzeba wziąć pod uwagę w realistycznym modelowaniu transportu jonów potasu przez ten kanał. Chodzi tutaj o „filtr selektywny” tj. krótki i wąski element kanału białkowego determinujący kinetykę transportu. Model transportu jonów potasu przez ten filtr, oparty o teorię procesów Markowa, został szczegółowo opisany w pracy z prof. Kozakiem opublikowanej w prestiżowym czasopiśmie *Physica A* w 2010 roku.

Drugim kanałem opisanym w recenzowanej pracy jest kanał typu BK, który nie posiada filtra selektywnego mając w zamian – „bramkę” tzn. miejsce w kanale, które pod wpływem zmian napięcia otwiera się lub zamyka. Ten proces nazywa się kolokwialnie „bramkowaniem”. Nowym podejściem w modelowaniu działania kanałów BK jest opisana w pracy analiza pamięci dalekozasięgowej Hursta, której współautorem jest mgr Pawełek. Kolejnym, zasadniczym problemem podjętym w recenzowanej pracy było modelowanie wzbogacania powietrza w tlen przy pomocy membran magnetycznych techniką Monte Carlo. Wyniki tych badań wskazują jednoznacznie, że im mniejsza granulacja proszku magnetycznego i im większa wartość pola magnetycznego tym większe wzbogacenie powietrza (do 95 %). Są to ważne wskazania praktyczne.

Na zakończenie chciałbym wskazać na pewne drobne mankamenty i wątpliwości, które mam po przeczytaniu tej, niewątpliwie interesującej, pracy:

str. 9 w3d, jest... "zabrudzeniami"

Moim zdaniem powinno być raczej: szkodliwymi zjawiskami, takimi jak: fouling, polaryzacja stężeniowa, itp.

Str. 9 w1d, jest... "składników gazów oraz cieczy"

Uważam, że powinno być „mieszanin gazowych i ciekłych”.

Str. 37 w1d, jest... „po ogromnej ilości stanów konformacyjnych”

Powinno być raczej... "w dyskretnej przestrzeni stanów konformacyjnych”.

Str. 42 w2g, jest... "zjawisko agregacji..."

Pytanie: co agreguje?

Str. 57 w 10d, jest:... "[102,104,107,107]

Powinno być: [102,103,104,107]

Str.104 w2d, jest... "współczynniki dyfuzji w kanale wynosiły: 4Dpolym, 6Dpolm i 10D polym odpowiednio dla cząstek tlenu, azotu i agregatu.

Pytanie: Czy ta kolejność nie powinna być odwrócona?

Str. 117 poz.9 w „Literatura”, jest ..."brak miejsca”.

Pytanie: Co oznacza „brak miejsca”?

Str. 124 poz.108 w „Literatura”, jest... Frischb.. "[8 page(s) (article)].

Powinno być... Frisch..

Te uwagi nie umniejszają merytorycznej oceny pracy. Uważam, że podjęty trudny temat został poprawnie zrealizowany i udokumentowany. Prawie wszystkie rysunki są przygotowane prawidłowo i pozwalają czytelnikowi obserwować zachodzące zjawiska. Układ pracy też jest jej atutem, gdyż widać kolejne kroki, które doprowadzają do rozwiązania postawionych na wstępie zadań.

Uważam, że Doktorant w pełni wykazał się zdolnością do prowadzenia pracy naukowej, a przedstawione wyniki są bardzo starannie udokumentowane i opracowane. Praca spełnia wszystkie wymogi stawiane w Ustawie o tytule naukowym i stopniach naukowych, w związku z tym proponuję przyjąć ją bez zastrzeżeń i dopuścić do publicznej obrony.

