

**HISTORIA CHEMII TEORETYCZNEJ
W UNIWERSYTECIE MARII CURIE-
SKŁODOWSKIEJ W LUBLINIE**

HISTORY OF THEORETICAL CHEMISTRY IN MARIA
CURIE-SKŁODOWSKA UNIVERSITY IN LUBLIN

Małgorzata Borówko¹,
Jolanta Narkiewicz-Michalek¹

¹*Katedra Chemii Teoretycznej, Instytut Nauk Chemicznych,
Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie –Skłodowskiej w Lublinie
e-mail: jolanta.narkiewicz-michalek@mail.umcs.pl

Dr hab. Jolanta Narkiewicz-Michałek (magisterium – 1976, doktorat – 1980, habilitacja – 1995, prof. UMCS - 2001) była zatrudniona w Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie w latach 1975 – 2017. Kierowała Zakładem Chemii Teoretycznej UMCS od 2012 do przejścia na emeryturę w roku 2017. Jej badania dotyczyły teorii adsorpcji z fazy gazowej i z roztworów na heterogenicznych powierzchniach ciał stałych, teorii chromatografii, mechanizmu adsorpcji molekuł aromatycznych w zeolitach ZSM-5, modelowania adsorpcji i agregacji surfaktantów w obszarach międzyfazowych oraz przeciwutleniaczy w układach micelarnych. Opublikowała ponad 90 artykułów naukowych. Wypromowała 3 doktorów.

Prof. dr hab. Małgorzata Borówko (magisterium – 1976, doktorat – 1980, habilitacja – 1989, tytuł profesora - 2001) pracuje na Wydziale Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie. W latach 1996-2019 kierowała tu Zakładem Modelowania Procesów Fizykochemicznych. Zajmuje się teorią płynów niejednorodnych, teorią przemian fazowych i symulacjami molekularnymi. Jej badania dotyczą adsorpcji mieszanin gazowych, adsorpcji z roztworów wieloskładnikowych, chromatografii, modelowania reakcji chemicznych, adsorpcji na szczotkach polimerowych, nanocząstek ze zmodyfikowaną powierzchnią i wielu innych zagadnień. Wypromowała 3 doktorów. Należała do Advisory Board of Journal of Colloid and Interface Science (2001-2006). W roku 2001 uzyskała "Langmuir Lecture Award", nagrodę przyznaną przez Division of Colloid and Surface Chemistry, American Chemical Society.



<https://orcid.org/0000-0003-1461-249X>

ABSTRACT

The article describes the history of research in the field of theoretical chemistry at UMCS. The organizational structures within which this research was conducted were discussed. The most important research topics are briefly presented. The stages of the scientific career of employees of the Department of Theoretical Chemistry and the Department for the Modelling of Physicochemical Processes are described. The professional achievements of these scientists, awards and distinctions received by them are listed.

Keywords: theoretical chemistry, statistical thermodynamics, quantum chemistry, molecular simulations, history

Słowa kluczowe: chemia teoretyczna, termodynamika statystyczna, chemia kwantowa, symulacje molekularne, historia

WYKAZ STOSOWANYCH SKRÓTÓW

ASTRIUM SAS	- Airbus Defence & Space
CASSCF	- Complete Active Space Self-Consistent Field
C.N.R.S.	- Centre nationale de la recherche scientifique
DNA	- kwas deoksyrybonukleinowy
FNP	- Fundacja na rzecz Nauki Polskiej
FRSE	- Fundacja Rozwoju Systemu Edukacji
GIAO	- Gauge-Independent Atomic Orbita
ICHF PAN	- Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk
IKiFP PAN	- Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN
ISSHAC	- International Symposium Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids
MNiSW	- Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego
MC	- Monte Carlo
MD	- Molecular Dynamics
MOLCAS	- ab initio quantum chemistry software package
NANU	- Narodowa Akademia Nauk Ukrainy
NASA	- National Aeronautics and Space Administration
NAWA	- Narodowa Agencja Wymiany Akademickiej
NCBR	- Narodowe Centrum Badań i Rozwoju
NCN	- Narodowe Centrum Nauki
NMR	- Nuclear Magnetic Resonance
NWChem	- pakiet oprogramowania do obliczeń ab initio, który zawiera funkcje chemii kwantowej i dynamiki molekularnej
PAN	- Polska Akademia Nauk
PQS	- Parallel Quantum Solutions
PTChem	- Polskie Towarzystwo Chemiczne
Wigner RCP SZFKI	- Wigner Research Centre for Physics (RCP)
TUM	- Technische Universität München
UAS	- University of Applied Sciences
UMCS	- Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej
UMK	- Uniwersytet Mikołaja Kopernika
UNAM	- Universidad Nacional Autónoma de México
ZChT	- Zakład Chemii Teoretycznej
ZMPF	- Zakład Modelowania Procesów Fizykochemicznych
ZMS-5	- Zeolite Socony Mobile-5

WPROWADZENIE

Utworzenie Zakładu Chemii Teoretycznej w UMCS to jedna z wielkich idei Profesora Andrzeja Waksmundzkiego – twórcy lubelskiej szkoły fizykochemii powierzchni i chromatografii oraz inicjatora badań nad polską technologią wytwarzania światłowodów. Już w latach sześćdziesiątych Zakład Chemii Fizycznej kierowany przez Profesora Waksmundzkiego był jednym z wiodących w Europie Wschodniej ośrodków naukowych w tej dziedzinie. W laboratoriach Zakładu Chemii Fizycznej prowadzono wiele badań eksperymentalnych nad różnymi zjawiskami z dziedziny fizykochemii powierzchni. Szczególnie intensywne prace prowadzono w dziedzinie adsorpcji i chromatografii.

Owoce tych szeroko zakrojonych badań była imponująca liczba wyników, których interpretacja i przygotowanie do druku w wiodących czasopismach międzynarodowych wymagały pogłębionej analizy, również od strony teoretycznej.

Jedną z myśli Profesora Waksmundzkiego, która miała zaowocować dalszym dynamicznym rozwojem lubelskiej szkoły fizykochemii powierzchni było posiadanie w swoim zespole kogoś, kto miałby na tyle dobre przygotowanie teoretyczne, aby się tą pogłębioną analizą wyników zająć.

Na początku lat 60-tych ubiegłego wieku funkcjonowało na Uniwersytecie Jagiellońskim silne centrum dydaktyczno-badawcze chemii teoretycznej, kierowane przez prof. Kazimierza Gumińskiego. Jednym z jego zadań było przygotowanie kadr dla powstających w innych ośrodkach zespołów zajmujących się badaniami teoretycznymi w dziedzinie chemii.

Profesor Waksmundzki postanowił skorzystać z okazji i w 1967 r. namówił jednego ze swych asystentów mgr. Władysława Rudzińskiego do podjęcia studiów doktoranckich w Katedrze Chemii Teoretycznej Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie u dr. hab. Andrzeja Fulińskiego. W 1970 roku po obronie pracy doktorskiej zatytułowanej „*Jedno i dwucząsteczkowe funkcje dystrybucji w fazach adsorpcyjnych*” świeżo upieczony doktor powrócił do Lublina, by objąć stanowisko adiunkta w Katedrze Chemii Fizycznej i poprowadzić wykłady z chemii teoretycznej i fizyki chemicznej, które to przedmioty pojawiły się właśnie w nowym programie nauczania na studiach chemicznych. Jakże trafną była zatem decyzja Profesora Waksmundzkiego sprzed kilku lat, by jednego z wychowanków ukierunkować na uprawianie dyscypliny ogólnie zwanej chemią teoretyczną.

Wkrótce dr Rudziński zgromadził wokół siebie kilku młodszych, niezwykle zdolnych Kolegów, którzy podobnie jak on swoje zainteresowania naukowe i swoją karierę naukową wiązali z chemią teoretyczną. W 1974 na Wydziale Mat-Fiz-Chem UMCS odbyło się Jego kolokwium habilitacyjne, po którym udał się na roczny staż naukowy do Queen's University w Kingston w Kanadzie. Jego rozprawa habilitacyjna „*Adsorpcja Fizyczna na Heterogenicznych Powierzchniach Ciał Stałych*” została wyróżniona Nagrodą Ministra Edukacji Narodowej.

Po powrocie dr. hab. Władysława Rudzińskiego z Kanady rozpoczęto intensywne starania o utworzenie odrębnej jednostki naukowej o profilu teoretycznym. 4 grudnia

1975 decyzją J. M. Rektora UMCS istniejący już nieformalnie zespół naukowy został podniesiony do rangi Zakładu Chemii Teoretycznej (ZChT), którego kierownikiem został dr hab. Władysław Rudziński.

Przez wiele lat pracownicy ZChT prowadzili intensywne badania naukowe oraz zajęcia dydaktyczne z zakresu chemii teoretycznej, chemii kwantowej oraz termodynamiki statystycznej. W roku 1994 z ZChT „wypączkowała” nowa jednostka, jaką był Zakład Modelowania Procesów Fizykochemicznych (ZMPF). W ramach reorganizacji Uniwersytetu w roku 2019 oba Zakłady ponownie połączono tworząc Katedrę Chemii Teoretycznej.

1. ZAKŁAD CHEMII TEORETYCZNEJ

Pierwszy skład osobowy ZChT, obok jego kierownika, stanowili: Andrzej Dąbrowski, Mieczysław Jaroniec, Stefan Sokołowski, Leszek Łajtar, Jolanta Narkiewicz-Michałek i Małgorzata Borówko. W 1981 roku do ZChT dołączył Krzysztof Woliński, zatrudniony wcześniej w Zespole Tworzyw Sztucznych. Stałym współpracownikiem zespołu był również Andrzej Patrykiewicz z Zakładu Fizyki Chemicznej i Metod Rozdzielania.

Zakład rozwijał się bardzo szybko i w kolejnych latach zatrudniono w nim Joannę Piotrowską (1979), Roberta Charamasa (1989), Przemysława Podkościelnego (1990), Krzysztofa Nieszporaka (1993), Pawła Szabelskiego (2000), Mariusza Barczaka (2003), Mateusza Dracha (2004) i Damiana Nieckarza (2017). W działalności Zakładu uczestniczyli także liczni doktoranci.

Badania naukowe pracowników Zakładu dotyczyły głównie teorii zjawisk międzyfazowych. Jednak tematyka i zakres tych badań zmieniały się w czasie. Spróbujemy tu naszkicować ich historię.

W początkowym okresie aktywność badawcza młodego zespołu naukowego koncentrowała się na teoretycznej interpretacji danych eksperymentalnych dotyczących adsorpcji pojedynczych gazów i ich mieszanin na ciałach stałych, adsorpcji z roztworów na ciałach stałych oraz danych otrzymanywanych metodami chromatografii gazowej, cieczerwowej i cienkowarstwowej.

W badaniach skupiono się na efektach energetycznej niejednorodności powierzchni rzeczywistych adsorbentów. Problem stał się niejako „flagowym” tematem Zespołu. Opracowano strategię opisu adsorpcji na powierzchniach heterogenicznych w oparciu o całkowite równanie izoterm. Wyznaczano, między innymi, funkcje rozkładu energii adsorpcji z eksperymentalnych izoterm adsorpcji gazów i ich mieszanin. Proponowano również nowe równania izoterm adsorpcji dla powierzchni o znanym rozkładzie energii.

W badaniach tych wyjątkowo kreatywnie uczestniczył Mieczysław Jaroniec, który w roku 1976 obronił pracę doktorską zatytułowaną „*Fizyczna adsorpcja z mieszanin gazowych na heterogenicznych powierzchniach ciał stałych*”. Jego promotorem był prof. dr hab. W. Rudziński. W kolejnych latach dr M. Jaroniec prowadził intensywne badania zakończone uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego w oparciu o rozprawę „*Opis kinetyki i stanu równowagi adsorpcji z wieloskładnikowych mieszanin gazowych na powierzchniach ciał stałych*”. Szybko stworzył własny zespół badawczy, do którego należała Joanna Piotrowska oraz pracownicy innych zakładów, zajmujący się badaniami doświadczalnymi. Wypromował w UMCS 6 doktorów (Jan Czarnecki, Joanna Piotro-

wska, Marek Kosmulski, Anna Deryło-Marczewska, Adam W. Marczewski, Ryszard Dobrowolski).

Kolejnym tematem, nad którym pracowano w tym czasie, było zastosowanie równania całkowego do opisu adsorpcji mono- i wielowarstwowej z roztworów wieloskładnikowych na heterogenicznych powierzchniach ciał stałych. Teorią adsorpcji z roztworów wieloskładnikowych zajmował się już w latach sześćdziesiątych ubiegłego wieku prof. dr hab. Jarosław Ościk, którego prace były znane i cytowane w międzynarodowym środowisku naukowym. Pod Jego kierunkiem Andrzej Dąbrowski rozpoczął badania dotyczące roli heterogeniczności powierzchni w adsorpcji z roztworów. Ich podsumowaniem była praca doktorska Andrzeja Dąbrowskiego „*Adsorpcja z roztworów nieelektrolitów na homo- i heterogenicznych powierzchniach ciał stałych*”, obroniona w roku 1976. Opracowany formalizm został wykorzystany do ilościowej interpretacji efektów kalorymetrycznych adsorpcji w tego typu układach. W następnych latach A. Dąbrowski kontynuował badania adsorpcji z roztworów czego owocem było otrzymanie stopnia doktora habilitowanego za pracę „*Opis adsorpcji mono- i wielowarstwowej z roztworów nieelektrolitów na rzeczywistych powierzchniach ciał stałych*” (1985).

Temat adsorpcji z fazy gazowej oraz z roztworów interesował także innych pracowników ZChT. Tego zagadnienia dotyczyły wykonane pod kierunkiem prof. dr hab. W. Rudzińskiego prace doktorskie młodszych pracowników: Leszka Łajtara „*O roli topografii powierzchni w adsorpcji gazów na powierzchniach heterogenicznych*” (1978), J. Narkiewicz-Michałek „*Fizykochemiczne podstawy i optymalizacja procesu elucji izokratycznej i gradientowej*” (1980), Małgorzaty Borówko „*Opis adsorpcji z dwu i wieloskładnikowych mieszanin na rzeczywistych powierzchniach ciał stałych*” (1980) i Andrzeja Patrykiewicza „*Opis częściowo mobilnych i częściowo zlokalizowanych warstw adsorpcyjnych na powierzchniach ciał stałych*” (1980).

Dalsze badania mające na celu opracowanie teorii retencji w adsorpcyjnej chromatografii cieczowej zaowocowały uzyskaniem stopnia doktora habilitowanego przez dr Małgorzatę Borówko (w roku 1989 za pracę „*Opis chromatografii cieczowej z mieszaną fazą ruchomą w oparciu o teorię adsorpcji z roztworów wieloskładnikowych*”) oraz dr Jolantę Narkiewicz-Michałek (w roku 1996 na podstawie rozprawy „*Badania teoretyczne efektów heterogeniczności powierzchni fazy stacjonarnej w chromatografii adsorpcyjnej ciecz-ciało stałe*”).

Badania adsorpcji z roztworów kontynuował w drugiej połowie lat 80-tych doktorant prof. Rudzińskiego Jerzy Zajac z Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie (obecnie profesor w Laboratorium CNRS w Montpellier).

Kolejny temat realizowany w ZChT w latach 80-tych to badania przejść fazowych w warstwach zaadsorbowanych oraz wpływu heterogeniczności na izotermy adsorpcji, ciepła adsorpcji i pojemności cieplne w warstwach, w których takie przemiany zachodzą. Temat ten stanowił podstawę pracy doktorskiej Jacka Jagiełło z Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie (1984) wykonanej pod kierunkiem prof. Rudzińskiego.

Odmiernym torem rozwijała się kariera naukowa Stefan Sokołowski, który zainteresował się zastosowaniem zaawansowanych metod termodynamiki statystycznej do opisu warstw adsorpcyjnych na ciałach stałych. Po uzyskaniu stopnia magistra rozpoczął studia doktoranckie w Instytucie Chemii Fizycznej PAN w Warszawie, które ukończył w 1977 roku obroną pracy doktorskiej „*Rozwinięcia wirialne w trójwymiarowym modelu adsorpcji gazów na ciałach stałych*”. Jego promotorem był wybitny fizykochemik prof. dr hab. Jan Stecki. W roku 1987 na podstawie rozprawy „*Statystyczny opis adsorpcji gazów na ciałach stałych: dwu- i trójwymiarowe modele*

adsorpcji mobilnej” uzyskał stopień doktora habilitowanego. Był pierwszym członkiem zespołu, który stosował w badaniach symulacje molekularne. Wkrótce dołączyli do niego Andrzej Patrykiewicz i Małgorzata Borówko. Dynamiczny rozwój tej tematyki wymagał zapewnienia odpowiednich warunków administracyjnych i technicznych do jej realizacji. Początkowo grupa uzyskała status samodzielnej wydziałowej pracowni komputerowej, którą kierował dr hab. Stefan Sokołowski.

Równolegle z badaniami związanymi z zastosowaniem metod termodynamiki statystycznej do opisu zjawisk adsorpcyjnych na różnych granicach faz w ZChT prowadzono również badania, których idea było stosowanie metod obliczeniowych chemii kwantowej do rozwiązywania konkretnych problemów naukowych. Liderem grupy zajmującej się tą tematyką był Krzysztof Woliński, który dołączył formalnie do Zakładu w 1981 roku, po otrzymaniu stopnia doktora nauk chemicznych za pracę doktorską p.t. *„Perturbacyjne obliczenia polaryzowalności kwadrupolowych w zmiennych bazach funkcyjnych”*. Promotorem jego pracy był prof. Jerzy Sadlej z Instytutu Chemii Organicznej PAN w Warszawie. Stopień doktora habilitowanego uzyskał w roku 1994 na Wydziale Chemii UMCS na podstawie rozprawy *„Korelacja elektronowa oraz własności magnetyczne molekuł w rachunku zaburzeń”* (wyróżnionej nagrodą Ministra), a tytuł profesora w roku 2005. Najważniejsze tematy, którymi się zajmował dotyczyły opracowania efektywnej metody wyznaczania magnetycznych stałych ekranowania jąder (NMR) z wykorzystaniem baz funkcyjnych GIAO oraz zastosowania uogólnionego rachunku zaburzeń Møllera-Plesseta dla stanów otwartopowłokowych i wielokonfiguracyjnych. Profesor Woliński był również współtwórcą profesjonalnego pakietu do obliczeń kwantowo-chemicznych PQS (Parallel Quantum Solutions). Jego dwie wybitne prace *„Efficient Implementation of the Gauge-Independent Atomic Orbital Method for NMR Chemical Shift Calculations”* oraz *„Second-order perturbation theory with a CASSCF reference function”* opublikowane, odpowiednio, w Journal of the American Chemical Society oraz Journal of Physical Chemistry były cytowane blisko 9 tysięcy razy, a sumaryczna liczba cytowań Jego prac jest bliska 11 tysięcy.

W roku 1989 stażystą w Zakładzie Chemii Teoretycznej został Przemysław Podkościelny, który rozpoczął badania pod naukową opieką Andrzeja Dąbrowskiego. Owocem tej współpracy była Jego rozprawa doktorska pt.: *„Metody wyznaczania pojemności faz powierzchniowych formujących się na homogenicznych i heterogenicznych powierzchniach ciał stałych”* obroniona w 1996 roku. W późniejszym okresie tematyka badań grupy profesora A. Dąbrowskiego przesunęła się w kierunku opisu procesów adsorpcyjnych wykorzystywanych w ochronie środowiska i była realizowana we współpracy z prof. E. Robensem z Johannes Gutenberg University.

Bardzo ważnym projektem naukowym realizowanym w ZChT były badania adsorpcji surfaktantów na granicy faz roztwór/ciało stałe. Prowadzono je we współpracy z grupą badawczą dr. Stanisława Partyki z Laboratorium CNRS w Montpellier we Francji. Grupa ta wykonywała pomiary izoterm adsorpcji surfaktantów z roztworów wodnych na różnego typu adsorbentach oraz towarzyszących temu procesowi efektów entalpowych. Zadaniem zespołu teoretyków z Lublina było skonstruowanie modelu teoretycznego, który byłby w stanie opisać równocześnie oba rodzaje eksperymentu. Taki model oparty na teorii skalowania i zakładający, że faza zaadsorbowana jest mieszaniną agregatów surfaktantu o różnych rozmiarach został opracowany i z sukcesem zastosowany do ilościowej interpretacji izoterm adsorpcji i efektów entalpowych. W opracowanym modelu uwzględniono także niejednorodność

powierzchni adsorbentu. W skład zespołu realizującego ten temat wchodził W. Rudziński, J. Narkiewicz-Michałek, L. Łajtar i M. Drach.

Heterogeniczność powierzchni okazała się także kluczowa przy konstruowaniu opisu adsorpcji prostych jonów na granicy faz tlenek/roztwór elektrolitu. Tematyka ta była intensywnie rozwijana przez ponad dekadę przez zespół, w którego skład wchodził R. Charmas, W. Rudziński, W. Piasecki i P. Zarzycki. Proponowany opis teoretyczny oparty był na różnych modelach kompleksacji powierzchniowej i uwzględniał efekty heterogeniczności powierzchni tlenku. Nowością było to, że przedstawiony opis analityczny dotyczył zarówno izoterm adsorpcji jak i konfiguracyjnych efektów entalpowych. Rezultatem tych badań były liczne publikacje, których część powstała we współpracy z francuskimi kolegami z Laboratorium CNRS w Nancy (F. Villieras, F. Thomas). Badania te stanowiły podstawę rozprawy doktorskiej Roberta Charmasa, zatytułowanej „*Badania efektów niejednorodności powierzchni w adsorpcji jonów na granicy faz woda/tlenek metalu*”, przygotowanej pod kierunkiem prof. dr hab. Władysława Rudzińskiego i wyróżnionej Nagrodą Ministra Edukacji Narodowej (1993). W 2003 roku dr R. Charmas uzyskał stopień doktora habilitowanego na podstawie rozprawy „*Opis termodynamiczny adsorpcji jonów prostych na granicy faz tlenek metalu/roztwór elektrolitu oparty na wykorzystaniu modeli kompleksowania powierzchniowego*”. W następnym etapie badania równowagi adsorpcyjnej w układach tlenek metalu/elektrolit rozszerzono o badania kinetyki adsorpcji jonów i symulacje komputerowe (P. Zarzycki, P. Szabelski). Uzyskane wyniki stanowiły podstawę pracy doktorskiej Piotra Zarzyckiego pt. „*Badania teoretyczne równowagi i kinetyki adsorpcji jonów prostych na granicy faz tlenek metalu/roztwór elektrolitu*” przygotowanej pod opieką dr. hab. Roberta Charmasa.

W roku 1993 do Zakładu dołączył Krzysztof Nieszporek. Pod kierunkiem, prof. dr hab. A. Dąbrowskiego wykonał pracę doktorską pt. „*Opis teoretyczny izoterm adsorpcji mieszanin gazowych na powierzchniach heterogenicznych w oparciu o znajomość izoterm adsorpcji pojedynczych składników*” (1998). Kolejnym etapem Jego kariery naukowej było otrzymanie w roku 2007 stopnia doktora habilitowanego w oparciu o pracę „*Badania teoretyczne efektów entalpowych oraz równowagi adsorpcji dwuskładnikowych mieszanin gazowych na ciałach stałych*”.

Następny temat badawczy realizowany w Zakładzie Chemii Teoretycznej przez zespół w składzie: Paweł Szabelski, W. Rudziński, J. Narkiewicz-Michałek i prof. A. Chiang z Tajwanu to teoretyczna interpretacja procesu adsorpcji związków aromatycznych w syntetycznych zeolitach. W tym celu skonstruowano model matematyczny przewidujący charakterystyczne cechy izoterm adsorpcji i izosterycznych ciepł adsorpcji benzenu i p-ksylenu w zeolitach ZSM-5. W roku 2000 Paweł Szabelski uzyskał stopień doktora na podstawie rozprawy pt. „*Teoretyczny opis adsorpcji molekuł aromatycznych w sitach molekularnych typu ZSM-5*” (promotorem była dr hab. J. Narkiewicz-Michałek).

Ważnym tematem realizowanym przez zespół skupiony wokół prof. Rudzińskiego okazały się badania kinetyki procesu adsorpcji w różnych układach adsorpcyjnych. Początkowo analizowano adsorpcję z fazy gazowej opierając się na teorii transportu międzyfazowego (Statistical Rate Theory SRT) zaproponowanej przez Charlesa Warda w pierwszej połowie lat 80-tych XX wieku, którą zmodyfikowano uwzględniając dodatkowo heterogeniczność powierzchni ciał stałych. W oparciu o wyprowadzone równania kinetyki SRT udało się wyjaśnić przebieg dysocjatywnej adsorpcji azotu na katalizatorach żelazowych, decydującej o szybkości syntezy amoniaku oraz opisać ilościowo eksperymentalne krzywe kinetyczne procesu termodesorpcji (T. Pańczyk, W. Rudziński, T. Warzocha). Równania teorii SRT okazały się także przydatne do opisu

kinetyki adsorpcji protonów na granicy faz tlenek/elektrolit, gdyż pozwoliły wykazać, że to właśnie kinetyka procesu jest źródłem histerezy obserwowanej na krzywych miareczkowania potencjometrycznego i kalorymetrycznego. Na gruncie teorii SRT wykazano także, że za sukcesem kinetycznego równania Lagergrena w odniesieniu do wielu układów przemysłowych stoi energetyczna heterogeniczność stosowanych tam sorbentów.

W następnych latach w Zakładzie Chemii Teoretycznej powstały nowe zespoły badawcze - grupa skupiona wokół prof. Andrzeja Dąbrowskiego oraz grupa prof. Pawła Szabelskiego.

Pierwsza z nich (A. Dąbrowski, M. Barczak, P. Podkościelny, doktoranci) zainteresowała się problemami ochrony środowiska i podjęła zakończoną sukcesem próbę zorganizowania laboratorium, w którym doświadczalnie badano układy mające zastosowanie przemysłowe. Zespół zajmował się syntezą funkcjonalizowanych materiałów mezoporowatych opartych na krzemionce, ich wszechstronną charakterystyką fizykochemiczną oraz badaniem ich skuteczności w usuwaniu jonów metali ciężkich i antybiotyków z roztworów wodnych. Wynikiem tych badań było, między innymi, wykonanie przez Mariusza Barczaka pracy doktorskiej *„Synteza, charakterystyka i właściwości adsorpcyjne mostkowych polisilsekwioxanów funkcjonalizowanych grupami aminowymi i tiolowymi”*, a potem także uzyskanie przez niego stopnia doktora habilitowanego za osiągnięcie naukowe *„Funkcjonalizowane mezoporowate materiały krzemionkowe: synteza, właściwości i zastosowania adsorpcyjne”*.

Od odejścia prof. A. Dąbrowskiego w 2018 roku na emeryturę doświadczalnym zespołem wchodzącym w skład ZChT kieruje dr hab. M. Barczak. Zespół ten zajmuje się obecnie syntezą i charakterystyką materiałów nanoporowatych, zastosowaniem procesów sorpcyjnych w ochronie środowiska, projektowaniem chemii powierzchni różnego typu materiałów pod konkretne zastosowania, zastosowaniem włókien węglowych jako superkondensatorów, sorbentów szkodliwych substancji i materiałów fotoaktywnych oraz opracowywaniem nowych biomateriałów opartych na hydrożelach naturalnych i supramolekularnych.

Pracami drugiej grupy kieruje Paweł Szabelski, który w 2010 roku uzyskał stopień doktora habilitowanego na podstawie rozprawy *„Badania teoretyczne adsorpcji cząsteczek chiralnych na powierzchniach ciał stałych”*. Wspólnie z członkami swojego zespołu (D. Nieckarz, doktoranci) zajmuje się badaniami metodą symulacji Monte Carlo saomorganizacji cząsteczek funkcjonalnych na powierzchniach ciał stałych oraz reakcji polimeryzacji organicznych monomerów na powierzchniach aktywnych katalitycznie.

Przez cały okres funkcjonowania ZChT priorytetem profesora Rudzińskiego było przyciągnięcie do zakładu najzdolniejszych studentów. Odbywało się to poprzez studia indywidualne, polegające na zdawaniu dodatkowych egzaminów z wybranych przedmiotów matematycznych, a czasami również chemicznych. To dawało im świetne przygotowanie do rozwoju dalszej kariery naukowej, czy to na macierzystej uczelni, czy też w innych ośrodkach krajowych i zagranicznych.

W latach 90-tych w strukturze kadrowej Zakładu zaszły dwie istotne zmiany. W 1991 roku prof. dr hab. Mieczysław Jaroniec (patrz notka biograficzna) podjął decyzję o kontynuowaniu swojej kariery naukowej w USA – najpierw w Georgetown University, potem w Mc Master University, a ostatecznie w Kent State University. Dwa lata później do nowo utworzonej jednostki - Pracowni Komputerowej - odeszli Małgorzata Borówko i Stefan Sokołowski. Utworzenie pracowni związane było z pojawieniem się w programie studiów chemicznych nowego przedmiotu „podstawy użytkowania kompute-

rów” i niezwykle szybkiego rozwoju metod obliczeniowych. W roku 1996 pracownia przekształciła się w Zakład Modelowania Procesów Fizykochemicznych (ZMPF). Kierownikiem nowej jednostki została prof. Małgorzata Borówko i z powodzeniem pełniła tę funkcję do roku 2019, kiedy to doszło do ponownego połączenia obu zakładów i utworzenia Katedry Chemii Teoretycznej.

Zakład Chemii Teoretycznej stanowił zespół niezwykle twórczych i efektywnie pracujących naukowców. Przedstawimy teraz najważniejsze informacje o ich karierze.

Władysław Rudziński (magisterium – 1964, doktorat – 1970, habilitacja – 1974, tytuł profesora – 1982) był twórcą i pierwszym kierownikiem Zakładu Chemii Teoretycznej UMCS. Bardzo szybko osiągał kolejne stopnie i tytuły naukowe. Od roku 1992 pracował na stanowisku profesora zwyczajnego. Jego badania dotyczą zastosowania termodynamiki statystycznej do opisu adsorpcji gazów, mieszanin gazowych oraz roztworów na rzeczywistych powierzchniach ciał stałych. Szczególny wkład wniósł w poznanie roli jaką w przebiegu tych procesów odgrywa niejednorodność powierzchni adsorbentu. Badał również towarzyszące procesowi adsorpcji efekty kalorymetryczne. Zajmował się także teorią kinetyki adsorpcji, teoretycznym opisem adsorpcji elektrolitów prostych i surfaktantów na ciałach stałych oraz teorią chromatografii. Współpracował z licznymi ośrodkami naukowymi, odbywając tam staże, pobyty badawcze albo pracując jako profesor wizytujący. Były to między innymi: Laboratorium Instytutu Petrochemicznego Węgierskiej Akademii Nauk, Queen’s University w Kingston w Kanadzie (u prof. B. Wojciechowskiego), Instytut Chemii Analitycznej Uniwersytetu Wiedeńskiego (u prof. JFK Hubera), Uniwersytet w Lipsku, gdzie był wykładowcą szkoły chemii fizycznej im. Profesora Wilhelma Ostwalda, Laboratorium Prof. Y. Ogino w Tohoku University w Japonii, Laboratorium C.N.R.S. w Montpellier i Nancy, Laboratorium Profesora Findenegga w Ruhr-Universitaet w Bohum, Seoul National University i Chonnam National University w Korei Południowej oraz w National Chung Cheng University na Tajwanie. Opublikował około 300 oryginalnych artykułów naukowych, wiele rozdziałów w monografiach. Był edytorem monografii *“Equilibria and Dynamics of Gas Adsorption on Heterogeneous Surfaces”*, W. Rudziński, W.A. Steele and G. Zgrablich, Eds, (Elsevier 1997) oraz autorem książki *“Adsorption of Gases on Heterogeneous Surfaces”*, W. Rudziński, D. H. Everett (Academic Press, 1992). Wypromował 14 doktorów (patrz zdjęcie 1). Wśród nich tytuły profesora uzyskali: Mieczysław Jaroniec, Andrzej Patrykiewicz, Małgorzata Borówko, Jerzy Zając, Tomasz Pańczyk i Wojciech Płaziński. Był członkiem Komitetów Redakcyjnych czasopism Langmuir, Adsorption oraz Adsorption Science and Technology. Przez wiele lat pełnił funkcję redaktora części chemicznej Annales UMCS. Zainicjował, wspólnie z profesorem Bohdanem Wojciechowskim z Queen’s University, tradycję organizowania przez ZChT cyklicznych międzynarodowych sympozjów „Effects of Surface Heterogeneity in Adsorption and Catalysis on Solids” (ISSHAC). Dotychczas odbyło się 11 takich konferencji. Był pięciokrotnie wyróżniany Nagrodą Ministra Edukacji Narodowej. Sprawował funkcję Prezesa Polskiego Towarzystwa Chemicznego. Wspólnie z Profesorem Romanem Lebołą był pomysłodawcą stworzenia sekcji PTChem „Fizykochemia Zjawisk Międzyfazowych”, której przez wiele lat przewodniczył. Szkic przeglądu badań prof. W. Rudzińskiego przedstawiono we wstępie do specjalnego wydania Adsorption Science and Technology opublikowanego z okazji sześćdziesiątej rocznicy Jego urodzin [2].



Zdjęcie 1. Pamiątkowe tableau, które uczniowie sprezentowali swojemu mistrzowi prof. Władysławowi Rudzińskiemu w siedemdziesiątą rocznicę urodzin. Od lewej: M. Borówko, T. Pańczyk, J. Jagiełło, K. Pilorz, W. Piasecki, J. Zając, M. Jaroniec, L. Łajtar, R. Charmas, W. Płaziński, A. Dominko, J. Narkiewicz-Michałek, G. Panas, A. Patrykiewicz.

Photo 1. A commemorative tableau that the PhD students presented to their master, Prof. Władysław Rudziński on his seventieth birthday. From left: M. Borówko, T. Pańczyk, J. Jagiełło, K. Pilorz, W. Piasecki, J. Zając, M. Jaroniec, L. Łajtar, R. Charmas, W. Płaziński, A. Dominko, J. Narkiewicz-Michałek, G. Panas, A. Patrykiewicz.

Andrzej Dąbrowski (magisterium - 1970, doktorat - 1976, habilitacja - 1985, tytuł profesora - 1997) był jednym z pierwszych chemików teoretyków w UMCS. Jego zainteresowania naukowe dotyczyły przede wszystkim teoretycznego opisu adsorpcji z roztworów oraz licznych zastosowań tego procesu w ochronie środowiska. Odbił staże naukowe w szkołach wyższych i jednostkach badawczych, między innymi w Niemczech, Francji, Rosji i na Węgrzech. Opublikował około 200 artykułów w prestiżowych czasopismach naukowych. Był edytorem trzech obszernych monografii: *"Adsorption on New and Modified Inorganic Sorbents"*, A. Dąbrowski, V.A. Tertykh, Eds, (Elsevier, 1996) oraz *"Adsorption and its applications in industry and environmental protection"*, A. Dąbrowski, Ed., Vol. I, II, (Elsevier, 1999). Wypromował 8 doktorów (Przemysław Podkościelny, Zygmunt Fekner, Krzysztof Nieszporek, Mariusz Barczak, Dorota Oźga, Katarzyna Michałek, Monika Oszust, Karolina Gdula). Pełnił ważne funkcje organizacyjne. Był prodziekanem Wydziału Mat-Fiz-Chem UMCS (1987-1989), a później, po reorganizacji, prodziekanem (1989-1990) i dziekanem (1990-1996, 2002-2008) Wydziału Chemii. W okresie 2008–2012 pełnił funkcję Rektora Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej. Był członkiem Komitetu Chemii PAN.

Mieczysław Jaroniec (magisterium - 1972, doktorat - 1976, habilitacja - 1979, tytuł profesora - 1985) pracował w ZChT do roku 1991. W tym samym roku wyjechał do USA i podjął pracę w Zakładzie Chemii i Biochemii, Kent State University. W połowie roku 2023 przeszedł na emeryturę, chociaż wciąż kontynuuje badania naukowe jako Profesor Emeritus. Jego główne zainteresowania naukowe dotyczą chemii zjawisk powierzchniowych, przede wszystkim adsorpcji na granicy faz gaz/ciało stałe i ciecz/ciało stałe oraz chemii materiałów nanoporowatych ze szczególnym uwzględnieniem nanomateriałów o uporządkowanych i hierarchicznych strukturach. Materiały te mają zastosowanie w ochronie środowiska (np. do usuwania jonów metali ciężkich, fotokatalitycznej degradacji toksycznych związków organicznych, adsorpcji dwutlenku węgla), jak i do magazynowania/wytwarzania energii. Badania grupy prof. Jarońca koncentrują się na syntezie, modyfikacji i charakterystyce różnorodnych materiałów o uporządkowanych strukturach nanoporowatych takich jak krzemionki, krzemionki z grupami organicznymi, tlenki metali (np. glinu, tytanu), żywice fenolowe, węgle oraz materiały kompozytowe. Prof. Jaroniec jest autorem i współautorem ponad 1100 artykułów naukowych. Liczba cytowań tych prac, wg bazy Web of Science, jest bliska 110 000 (bez autocytowań). Od roku 2016 prof. Jaroniec znajduje się na liście Web of Science wśród najczęściej cytowanych naukowców w dziedzinie chemii i nauki o materiałach. Opublikował książkę *“Physical Adsorption on Heterogeneous Solids”*, M. Jaroniec, R. Madey, (Elsevier, 1988). Ponadto jest (lub był) członkiem komitetów redakcyjnych w wielu czasopismach, m.in. Adsorption, Advanced Porous Materials, Applied Surface Science Advances, Journal of Porous Materials, Chemistry Materials, Journal of Liquid Chromatography, Journal of Colloid and Interface Science, Materials Today Sustainability, Nano-Micro Letters, Wiadomości Chemiczne. Od roku 2019 jest jednym z zastępców głównego Edytora czasopisma Science Advances, którego wydawcą jest American Association for the Advancement of Science. Otrzymał także wiele nagród i wyróżnień, między innymi doktoraty honoris causa Uniwersytetu im. Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wojskowej Akademii Technicznej w Warszawie, i Politechniki Poznańskiej oraz tytuł Profesora Honorowego Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie. Polskie Towarzystwo Chemiczne nadało Mu w roku 2007 medal Andrzeja Waksmundzkiego za osiągnięcia w nauce o separacji, a w roku 2016 medal Marii Curie-Skłodowskiej przyznawany chemikom pracującym na stałe poza granicami Polski. Był też wielokrotnie wyróżniany w Kent State University nagrodami za badania naukowe i kształcenie młodej kadry naukowej, między innymi otrzymał Distinguished Scholar Award w roku 2002, oraz dwukrotnie President Faculty Excellence Award w roku 2016 i 2022.

Krzysztof Woliński (magisterium - 1974, doktorat - 1981, habilitacja - 1995, tytuł profesora - 2005) jako pierwszy w naszym ośrodku podjął badania naukowe z zakresu chemii kwantowej. Zajmował się efektywnymi metodami wyznaczenia magnetycznych stałych ekranowania jąder (NMR) z wykorzystaniem baz funkcyjnych GIAO i uogólnionego rachunku zaburzeń Møllera-Plesseta dla stanów otwartopowłokowych i wielokonfiguracyjnych oraz teoretycznymi aspektami mechanochemii i zastosowaniem sił zewnętrznych w penetracji powierzchni energii potencjalnej. Jest autorem około 70 artykułów naukowych oraz współautorem profesjonalnego pakietu do obliczeń kwantowo-chemicznych PQS (Parallel Quantum Solutions). Jest jednym z najczęściej cytowanych polskich chemików. Wypromował 3 doktorów (Tomasz Janowski, Justyna Jaroniec, Agnieszka Brzyska). Współpracował z wieloma ośrodkami zagranicznymi, między innymi z University of Lund, University

of Arkansas, z Pacific Northwest National Laboratory (USA). Prof. dr hab. Krzysztof Woliński zmarł w roku 2022. W naszej pamięci pozostał jako błyskotliwy naukowiec, wspaniały wykładowca, dobry i życzliwy kolega.

Leszek Łajtar (magisterium: z chemii (1974) i matematyki (1975), doktorat - 1978). Rozpoczął pracę w Zakładzie Chemii Fizycznej UMCS w 1973 roku, a po trzech latach przeniósł się do Zakładu Chemii Teoretycznej, w którym pracował do 2018 roku, najpierw na stanowisku adiunkta, a potem starszego wykładowcy. Jego praca doktorska została wyróżniona Nagrodą Ministra Nauki, Szkolnictwa Wyższego i Techniki. W 1991 roku przebywał w Niemczech na stażu naukowym Centrum Obliczeniowym (HLRZ) Instytutu Jądrowego (KFA) w Julich. Jest współautorem 30 artykułów naukowych opublikowanych w większości w zagranicznych czasopismach o zasięgu międzynarodowym. W związku z utworzeniem na kierunku chemia nowych specjalności (nauczanie chemii i fizyki, chemia informatyczna) podjął się prowadzenia na tych kierunkach wykładów oraz ćwiczeń z matematyki i statystyki.

Jolanta Narkiewicz-Michalek (magisterium – 1976, doktorat – 1980, habilitacja – 1995) była jednym z pierwszych pracowników ZChT. Od grudnia 2001 pracowała na stanowisku profesora UMCS. Początkowo tematyka jej prac badawczych dotyczyła zastosowania teorii adsorpcji z fazy gazowej i z roztworów na heterogenicznych powierzchniach ciał stałych do opisu współczynnika retencji w chromatografii cieczy stałe. Po habilitacji skoncentrowała się na opisie mechanizmu adsorpcji molekuł aromatycznych w zeolitach ZSM-5 oraz modelowaniu agregacji surfaktantów w roztworach wodnych oraz ich adsorpcji i agregacji w obszarach międzyfazowych. Prowadziła także badania teoretyczne solubilizacji molekuł organicznych (m. in. witamin) w agregatach surfaktantów (wspólnie z dr hab. Martą Szymulą). Opublikowała ponad 90 artykułów naukowych. Wypromowała 3 doktorów (Paweł Szabelski, Mateusz Drach, Anna Andrzejewska). W latach 2012-2017 pełniła funkcję kierownika Zakładu Chemii Teoretycznej. Była współorganizatorem międzynarodowych konferencji ISSHAC odbywających się cyklicznie co trzy lata od roku 1992. Przez wiele lat pełniła funkcję przewodniczącej Lubelskiego Oddziału Polskiego Towarzystwa Chemicznego i III Wydziału Lubelskiego Towarzystwa Naukowego.

Dr Joanna Piotrowska (magisterium – 1979, doktorat – 1984) pracowała w ZChT do roku 1992. Swoją pracę doktorską „*Adsorpcja gazów, mieszanin gazowych i ciekłych na niejednorodnych mikroporowatych ciałach stałych*” obroniła w roku 1984. Zajmowała się teorią adsorpcji i teorią chromatografii. W roku 1992 wyemigrowała do USA i pracowała jako nauczyciel akademicki w Minneapolis.

Dr Przemysław Podkościelny (magisterium - 1990, doktorat - 1996) został zatrudniony w ZChT w 1989 roku jako pracownik naukowo-dydaktyczny, od 2008 r. pracuje na stanowisku starszego wykładowcy. Jego zainteresowania naukowe koncentrują się na teoretycznych badaniach procesu adsorpcji substancji z roztworów na heterogenicznych powierzchniach ciał stałych. Szczególną rolę zajmują tutaj badania dotyczące zjawiska adsorpcji prostych aromatycznych związków organicznych z roztworów wodnych na węglach aktywnych oraz wielościennych nanorurkach węglowych. Jest współautorem ponad 40 publikacji. Prowadzi zajęcia z wielu różnych przedmiotów, m.in. z podstaw chemii kwantowej, chemii teoretycznej, podstaw chemii ogólnej, chemii analitycznej, metod termodynamiki statystycznej w chemii fizycznej, seminaria oraz pracownie magisterskie i dyplomowe. Dr P. Podko-

ścielny z zaangażowaniem bierze udział w różnych pracach na rzecz Wydziału Chemii UMCS.

Dr hab. Robert Charmas (magisterium - 1989, doktorat - 1993, habilitacja - 2003) pracował w ZChT w latach 1989-2004. W 1993 r. otrzymał stypendium Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej dla młodych naukowców. W latach 1997-1998 przebywał na stypendium zagranicznym Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej w Laboratoire Environnement et Mineralurgie CNRS w Nancy we Francji. W 2001 r. otrzymał stypendium Ministra Badań Naukowych Rządu Francuskiego (Senior Scientist Fellowship) wykorzystane na czteromiesięczny pobyt w Laboratoire Environnement et Mineralurgie CNRS w Nancy we Francji. Jego prace dotyczą procesów fizykochemicznych na granicy faz ciało stałe/ciecz oraz zagadnień z zakresu biochemii wysiłku fizycznego. Opublikował ok. 60 oryginalnych prac naukowych w czasopiśmie z listy filadelfijskiej. W roku 2004 przeniósł się do Akademii Wychowania Fizycznego Józefa Piłsudskiego w Warszawie (Zamiejscowy Wydział Wychowania Fizycznego w Białej Podlaskiej), a następnie do Państwowej Wyższej Szkoły Informatyki i Przedsiębiorczości w Łomży, gdzie pełnił funkcję Rektora w latach 2009-2017.

Dr hab. Krzysztof Nieszporek, profesor UMCS (magisterium - 1993, doktorat - 1998, habilitacja - 2007) w roku 2017 został kierownikiem ZChT, a od 2019 pełni funkcję kierownika Katedry Chemii Teoretycznej. W obszarze zainteresowań naukowych dr hab. Krzysztofa Nieszporka oprócz zagadnienia adsorpcji mieszanin gazowych na heterogenicznych powierzchniach ciał stałych znajdują się także symulacje metodami klasycznej dynamiki molekularnej procesów separacji mieszanin gazowych na nanoporowatym grafenie, dynamika wiązań wodorowych oraz oddziaływania niekanonicznych form DNA z grafenem. W ramach współpracy naukowej z prof. Tomaszem Pańczykiem (IChF PAN w Krakowie) prowadzi badania teoretyczne procesów mechanicznej degradacji tworzyw sztucznych. Jest autorem ponad 60 prac naukowych opublikowanych w większości w czasopiśmie z listy filadelfijskiej.

Prof. dr hab. Paweł Szabelski (magisterium - 1996, doktorat - 2000, habilitacja - 2010, tytuł profesora - 2019) związał się z ZChT już w trakcie studiów chemicznych w UMCS. Początkowo Jego badania naukowe dotyczyły teoretycznego opisu adsorpcji molekuł aromatycznych w zeolitach i efektów entalpowych tego procesu, a następnie skoncentrował się na symulacjach Monte Carlo samoorganizacji cząsteczek funkcjonalnych na dobrze zdefiniowanych powierzchniach oraz reakcji polimeryzacji na powierzchniach aktywnych katalitycznie. Odbił staż podoktorski w Uniwersytecie Tennessee, Knoxville w USA (2000/2001). Fundacja Nauki Polskiej przyznała Mu dwukrotnie stypendium dla młodych naukowców (2003, 2004). W roku 2006 otrzymał Fulbright Advanced Research Grant w Uniwersytecie Carnegie Mellon w Pittsburghu, USA. Kierował kilkoma projektami badawczymi finansowanymi przez NCN. Opublikował 106 artykułów naukowych. Był promotorem 4 doktoratów (Adam Kasperski, Aleksandra Woszczyk, Damian Nieckarz, Jakub Lisiecki).

Dr Mateusz Drach (magisterium - 1995, doktorat - 2000) odbył w UMCS studia doktoranckie zakończone obroną pracy doktorskiej „*Studia nad mechanizmem adsorpcji surfaktantów jonowych i niejonowych na polarnych powierzchniach ciał stałych*” wykonanej pod kierunkiem dr hab. Jolanty Narkiewicz-Michałek. W latach 2000-2004 był zatrudniony w Zespole Teorii Adsorpcji Instytutu Katalizy i Fizykoche-

mii Powierzchni PAN w Krakowie (placówka w Lublinie), a w latach 2004-2016 pracował jako adiunkt w Zakładzie Chemii Teoretycznej. Jego zainteresowania naukowe to adsorpcja surfaktantów na heterogenicznych powierzchniach ciał stałych i efekty entalpowe adsorpcji, nowoczesne metody obliczeniowe (MC i MD) i ich zastosowanie w badaniach adsorpcji związków chiralnych na dobrze zdefiniowanych powierzchniach, oddziaływania różnych substancji z funkcjonalizowanymi nanorurkami węglowymi i inne. Był wykonawcą w kilku grantach realizowanych na Wydziale. Ponadto wspomagał zespół zajmując się konfiguracją i administracją systemami operacyjnymi Linux oraz konfiguracją i zarządzaniem klastrami obliczeniowymi. Opublikował ponad 30 prac naukowych.

Dr hab. Mariusz Barczak, profesor UMCS (magisterium - 2003, doktorat - 2007, habilitacja - 2020) został zatrudniony w ZChT w roku 2003. Tu przechodził kolejne szczeble kariery naukowej i obecnie pracuje na stanowisku profesora UMCS. Tematyka jego badań to nanotechnologia, chemia i inżynieria materiałowa. Koncentruje się na otrzymywaniu zmodyfikowanych materiałów porowatych metodą zol-żel, problemem zanieczyszczenia wód i remediacją oraz waloryzacją materiałów. W kręgu Jego zainteresowań są materiały hybrydowe, kompozyty, cienkie warstwy, pokrycia, tekstylia, ferrozele i czujniki. Opublikował około 100 prac, z czego ponad 70 jest indeksowanych w bazie Scopus. Prowadzi szeroką współpracę międzynarodową z zespołami: prof. Teresy Bandosz z The City College of New York, Prof. Fernando Gonzalez-Caballero i Prof. Modesto T. Lopez-Lopeza z Facultad de Ciencias Universidad de Granada, Prof. Colette McDonagh z National Centre for Sensor Research, Dublin City University i Prof. Xavierem Coqueretem z Université de Reims Champagne-Ardenne. Odbył liczne staże zagraniczne: w Instytucie Chemii Powierzchni Narodowej Akademii Nauk Ukrainy (2005), w Uniwersytecie Stanforda (2013), w Centrum NASA w Mountain View USA (2013), w Instytucie Diagnostyki Biomedycznej (2015), był na stypendium Fulbrighta w City University w Nowym Jorku (2017) oraz w Uniwersytecie w Granadzie (2019-2020) (Baker Fellowship). Pełnił funkcję promotora pomocniczego w dwóch przewodach doktorskich (Monika Oszust i Katarzyna Michalak). Był wykonawcą i kierownikiem różnych projektów naukowych finansowanych przez MNiSW, NCN, FNP, FRSE, UMCS, NAWA, NCBR, ASTRIUM SAS, Fundację Fulbrighta i Fundację Kościuszkowską.

Dr Damian Nieckarz (magisterium - 2011, doktorat - 2016) otrzymał stopień magistra chemii na Wydziale Chemii UMCS, następnie odbył tu studia doktoranckie. Po obronie pracy doktorskiej „*Badania teoretyczne samoorganizacji cząsteczek w metaloorganicznych warstwach zaadsorbowanych*” wyjechał na roczny staż w Uniwersytecie Warszawskim. W roku 2017 został zatrudniony w ZChT. Zajmuje się zastosowaniem symulacji komputerowych Monte Carlo w badaniach procesów samoorganizacji prostych cząsteczek organicznych na powierzchniach płaskich. Jest autorem 35 publikacji naukowych. Brał udział w realizacji kilku projektów NCN. Jest kierownikiem grantu badawczego „*Badania teoretyczne procesów samoorganizacji w metaloorganicznych warstwach zaadsorbowanych*” (NCN SONATA 14).

Działalność naukową prof. S. Sokołowskiego i prof. M. Borówko opiszemy w części poświęconej Zakładowi Modelowania Procesów Fizykochemicznych.

W ZChT pracowały także mgr Anna Zajączkowska (1993-2001) i mgr Monika Iskierko-Wichrowska (1997-2016), które wspomagały od strony technicznej i administracyjnej działalność naukową i dydaktyczną ZChT.

Ważną datą dla Zakładu Chemii Teoretycznej był rok 1999. Na mocy porozumienia pomiędzy Uniwersytetem Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie a Instytutem Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie na terenie Zakładu Chemii Teoretycznej rozpoczęła działalność placówka PAN-owska - Zespół Teorii Adsorpcji. Jego kierownikiem został prof. Władysław Rudziński, pełniący jednocześnie funkcję Kierownika Zakładu Chemii Teoretycznej. Współpraca pomiędzy obiema jednostkami od początku układała się pomyślnie, „ku obopólnej korzyści”. W roku 2012 ster Zespołu Teorii Adsorpcji przejął dr hab. Tomasz Pańczyk – wybitnie uzdolniony absolwent studiów chemicznych na UMCS - uczeń a potem doktorant profesora Rudzińskiego. Obecnie w Zespole Teorii Adsorpcji pracuje czworo absolwentów UMCS: prof. dr hab. Tomasz Pańczyk, prof. dr hab. Wojciech Płaziński, dr Paweł Wolski i dr Agnieszka Brzyska.

Pracownicy ZChT zawsze starali się współpracować z koleżankami i kolegami z innych zakładów pomagając im w interpretacji uzyskanych wyników. Szczególnie bliska współpraca istniała z Zakładem Chemii Fizycznej, w którym mierzono nadmiarowe izotermie adsorpcji z roztworów i współczynniki pojemnościowe w chromatografii ciecz/ciało stałe, a w ZChT dokonywano ich interpretacji (M. Jaroniec, M. Borówko). J. Narkiewicz-Michałek zaangażowała się we współpracę z zespołem dr hab. Marty Szymuli z Zakładu Radiochemii i Chemii Koloidów, który prowadził badania antyoksydacyjnych właściwości niektórych witamin w układach micelarnych. Krzysztof Nieszporek współpracuje z pracownikami Zakładu Chemii Analitycznej badając wpływ dynamiki wiązań wodorowych w warstwach solwatacyjnych jonów na procesy elektrodowe.

W ciągu blisko 45 lat istnienia Zakładu Chemii Teoretycznej przez Zakład przewinęło się około 40 pracowników naukowych i doktorantów, którzy opublikowali ponad 1000 artykułów i monografii naukowych. W tym okresie pięciu pracowników otrzymało tytuły profesora nauk chemicznych

Z inicjatywy prof. W. Rudzińskiego tytuł doktora honoris causa Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej otrzymali: William Steele z Penn State University oraz laureat Nagrody Nobla prof. Gerhard Ertl z Instytutu Fritza-Habera w Berlinie.

W roku 2014 prof. dr hab. Władysław Rudziński przeszedł na emeryturę. Przez niemal 40 lat kierowania Zakładem udało mu się stworzyć liczny i prężny zespół chemików teoretyków. Profesor zawsze bardzo dbał o kształcenie młodych pracowników naukowych, wymagając od nich studiowania matematyki oraz zdawania egzaminów z różnych przedmiotów teoretycznych u uznanych specjalistów z całego kraju. W Zakładzie panowała atmosfera swobody naukowej i współpracy, co stymulowało szybki rozwój młodych adeptów chemii teoretycznej. Dzięki licznym kontaktom z ośrodkami zagranicznym, odegrał kluczową rolę we wprowadzeniu naszej grupy w międzynarodowe środowisko naukowe.



Zdjęcie 2. Uroczystość nadania tytułu doktora honoris causa UMCS profesorowi Williamowi Steele z Penn State University (rok 1994). Po lewej stronie siedzi prof. Władysław Rudziński, po prawej prof. William Steele.

Photo 2. Ceremony of awarding the title of doctor honoris causa of UMCS to Professor William Steele from Penn State University (1994). On the left side prof. Władysław Rudziński, on the right side prof. William Steele.



Zdjęcie 3. Pracownicy i doktoranci Zakładu Chemii Teoretycznej i Zespołu Teorii Adsorpcji IKiFP PAN (2016). Siedzą od lewej: prof. W. Rudziński, prof. A. Dąbrowski, dr hab. J. Narkiewicz-Michałek, mgr M. Iskierko-Wichrowska, prof. W. Płaziński. Stoją od lewej: prof. T. Pańczyk, prof. P. Szabelski, dr A. Woszczyk, dr M. Drach, dr A. Kasperski, dr K. Nieckarz, dr Ł. Konczak, dr L. Łajtar, dr P. Podkościelny, dr hab. M. Barczak, dr hab. K. Nieszporek

Photo 3. Employees and PhD students of the Department of Theoretical Chemistry and the Adsorption Theory Group of the IKiFP PAN (2016). Seated from left: prof. W. Rudziński, prof. A. Dąbrowski, J. Narkiewicz-Michałek, PhD, DSc, M. Iskierko-Wichrowska, MA, prof. W. Płaziński. Standing from left: prof. T. Pańczyk, prof. P. Szabelski, dr A. Woszczyk, dr M. Drach, dr A. Kasperski, dr K. Nieckarz, dr Ł. Konczak, dr L. Łajtar, dr P. Podkościelny, M. Barczak, PhD, DSc, K. Nieszporek, PhD, Dsc.

2. ZAKŁAD MODELOWANIA PROCESÓW FIZYKOCHEMICZNYCH

Zakład Modelowania Procesów Fizykochemicznych (ZMPF) został powołany w roku 1996 i zlikwidowany w ramach reorganizacji Uniwersytetu w roku 2019, czyli istniał prawie ćwierć wieku. Kierownikiem Zakładu była prof. dr hab. Małgorzata Borówko. W tym okresie osiągnięto znaczące sukcesy badawcze i dydaktyczne, co w istotnym stopniu przyczyniło się do rozwoju Wydziału Chemii UMCS.

Pierwszymi pracownikami Zakładu byli profesorowie Małgorzata Borówko i Stefan Sokołowski. Szybko wokół nich skupiła się spora grupa zapaleńców, których zainteresowała możliwość teoretycznego przewidywania zachowania się złożonych układów i stosowania w tym celu nowoczesnych technik komputerowych. Byli wśród nich pracownicy oraz doktoranci. Wszyscy prowadzili bardzo intensywną działalność badawczą, sprawnie zdobywając kolejne szczeble awansu akademickiego.

Zainteresowania naukowe pracowników ZMPF naukowe skupiały się wokół zastosowania metod termodynamiki statystycznej i symulacji molekularnych do badania złożonych procesów fizykochemicznych. Prace te dotyczyły, między innymi, płynów molekularnych, zjawisk międzyfazowych, przemian fazowych, zjawisk krytycznych, samoorganizacji, modelowania reakcji chemicznych, polimerów, adsorpcji na glebach oraz chromatografii. W badaniach stosowano różne wersje teorii funkcjonału gęstości, teorie równań całkowych, symulacje Monte Carlo, dynamikę molekularną oraz szereg innych metod teoretycznych. Metody te odpowiednio modyfikowano i stosowano do opisu coraz bardziej skomplikowanych układów.

Każdy z członków Zespołu wniósł swój unikalny wkład w badania. Ze względu na ograniczoną objętość tego artykułu przedstawiamy tylko wybrane informacje o pracownikach naukowych Zakładu i ich osiągnięciach.

Inicjatorem stworzenia ośrodka symulacji molekularnych w Wydziale Chemii UMCS, a także pewnego przekierowania zainteresowań naukowych w stronę fizyki teoretycznej, był **prof. dr hab. Stefan Sokołowski**. Od ponad pół wieku jest On związany z UMCS, gdzie w 1973 ukończył studia chemiczne i rozpoczął pracę jako asystent. Jak już wspomniano, w trakcie studiów doktoranckich w Instytucie Chemii Fizycznej w Warszawie prowadził prace dotyczące zastosowania rozwinięć wirialnych do niejednorodnych modeli cieczy i w roku 1977 uzyskał stopień doktora nauk chemicznych. W latach następnych Jego badania koncentrowały się na statystycznym opisie adsorpcji na ciałach stałych, co zaowocowało otrzymaniem stopnia doktora habilitowanego (1987). Tytuł profesora nadano Mu w roku 1997.



Zdjęcie 4. Pracownicy i doktoranci Zakładu Modelowania Procesów Fizykochemicznych, rok 2001: od lewej prof. S. Sokołowski, mgr A. Sałamacha, mgr W. Cyrankiewicz, prof. M. Borówko, dr hab. P. Bryk, prof. A. Patrykiewicz, a za nimi dr hab. W. Rzyśko, dr K. Grabowski, dr R. Zagórski.

Photo 4. Employees and PhD students of the Department of Modeling of Physicochemical Processes, 2001: from left prof. S. Sokołowski, A. Sałamacha, MSc, W. Cyrankiewicz, MSc, prof. M. Borówko, P. Bryk, PhD, DSc, prof. A. Patrykiewicz, and behind them W. Rzyśko, PhD, DSc, dr K. Grabowski, dr R. Zagórski.

Prof. S. Sokołowski pracował w różnych zagranicznych ośrodkach badawczych: w Penn State University odbył staż podoktorski u Prof. W. A. Steela (1983-1984), w Institut für Thermo- und Fluiddynamic of Ruhr Universität w Bochum (1988) współpracował z prof. J. Fischerem, w Forschungszentrum w Jülich był profesorem wizytującym, prowadząc badania z prof. H. J. Herrmannem i A. C. Gallasem (1990–1991), w Universidad Autonoma Metropolitana w Meksyku pracował z prof. D. Hendersonem (1994). Do tego ostatniego miasta wracał wielokrotnie współpracując z Dr. Orestem Pizio (National Autonomous University of Mexico). Wynikiem współpracy z prof. J. Fischerem, było zaadaptowanie i modyfikacja teorii funkcjonu gęstości i teorii równań całkowych Borna-Green-Yvona do opisu mieszanin w porach. Wykonał także jedne z pierwszych symulacji molekularnych dotyczących przemian zwilżania na granicy faz argon/dwutlenek węgla. W pewnym okresie diametralnie zmienił swoją tematykę badawczą i zajął się transportem materiałów granularnych. Efektem tych badań było opublikowanie wspólnie z J. A. C. Gallasem i H. J. Herrmannem jednej z Jego najczęściej cytowanych prac (Phys. Rev. Lett., 1992, 69, 1371). W trakcie pobytów w Meksyku rozwijał teorię asocjujących płynów niejednorodnych i teorię podwójnej warstwy elektrycznej. W następnych latach rozszerzył swoją międzynarodową współpracę, podejmując badania z naukowcami

z wielu innych ośrodków naukowych (np., Brigham Young University, Provo, USA, Department of Neutron Physics, SZFKI, w Budapeszcie, Friedrich-Alexander Universitaet, Erlangen).

Rozległe kontakty prof. S. Sokołowskiego i Jego doświadczenie bardzo korzystnie wpływały na pracę całego zespołu. Profesor wprowadzał w świat nauki wielu studentów i młodszych pracowników. Wypromował czterech doktorów (Grzegorz Chmiel, Paweł Bryk, Joanna Reszko-Zygmunt, Katarzyna Bucior).

Prof. S. Sokołowski ma bardzo szerokie zainteresowania naukowe i znaczące osiągnięcia w różnych dziedzinach. Zarys podsumowania badań S. Sokołowskiego można znaleźć w przedmowie do specjalnego wydania *Condensed Matter Physics*, przygotowanego z okazji Jego sześćdziesiątych urodzin [3].

Prof. S. Sokołowski opublikował ponad 450 artykułów naukowych i szereg rozdziałów w książkach. Jest członkiem komitetu redakcyjnego czasopisma *Condensed Matter Physics*. Był wieloletnim członkiem Rady Naukowej ICHF PAN. Kierował różnymi projektami badawczymi, między innymi był kordynatorem Grantu CE “Statistical Thermodynamics and Computer Simulations of Complex Molecules in Bulk and at Surfaces“, który realizowano we współpracy z: Stranski Laboratorium fuer Physikalische und Theoretische Chemie, TUM, Berlin, Institute for Condensed Matter Physics, NANU, Lwów i Instituto de Quimica de la UNAM, Meksyk.

W roku 2019 prof. dr hab. Stefan Sokołowski został wyróżniony tytułem doktora *honoris causa* przez Radę Naukową Instytutu Fizyki Materii Skondensowanej Ukraińskiej Akademii Nauk we Lwowie.



Zdjęcie 5. Uroczystość wręczenia dyplomu nadania tytułu doktora honoris causa Instytutu Fizyki Materii Skondensowanej Narodowej Akademii Nauk Ukrainy we Lwowie prof. dr. hab. Stefanowi Sokołowskiemu. Ze względu na stan epidemii uroczystość ta odbyła się w UMCS w dniu 12 lutego 2021. Dyplom wręczył Konsul Generalny Ukrainy w Lublinie – Wasyl Pavluk (pierwszy z lewej).

Photo 5. Ceremony of awarding the diploma of the title of doctor honoris causa of the Institute of Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine in Lviv to prof. dr. hab. Stefan Sokołowski. Due to the state of epidemic, this ceremony took place at UMCS on February 12, 2021. The diploma was presented by the Consul General of Ukraine in Lublin - Wasyl Pavluk (first from the left).

Prof. dr hab. Małgorzata Borówko związana jest z UMCS od 1971, w którym rozpoczęła studia chemiczne, by potem osiągać w tym ośrodku kolejne szczeble awansu naukowego (doktorat - 1980, habilitacja - 1989, tytuł profesora – 2001). Wypromowała trzech doktorów (Wojciech Rżysko, Roman Zagórski, Tomasz Staszewski). Jest autorem lub współautorem 130 artykułów naukowych i kilku rozdziałów w monografiach. Była redaktorem książki *“Computational Methods in Surface and Colloid Science”*, M. Dekker, 2001.

Badania prof. Małgorzaty Borówko dotyczyły adsorpcji mieszanin gazowych, adsorpcji z roztworów wieloskładnikowych, teorii chromatografii, modelowania reakcji chemicznych, adsorpcji na szczotkach polimerowych, nanocząstek ze zmodyfikowaną powierzchnią i wielu innych zagadnień. Niezależnie od rozwiązywania problemów teoretycznych, zajmowała się także analizą chromatograficznych danych doświadczalnych. Badania te prowadziła wspólnie z dr hab. Barbarą Ościk-Mendyk.

Prof. Małgorzata Borówko dwukrotnie otrzymała Nagrodę Ministra. Należała do Advisory Board of Journal of Colloid and Interface Science (2001-2006). Była także

członkiem Komitetu Chemii PAN, Rady Naukowej IChF PAN w Warszawie oraz Senatu UMCS. W roku 2001 otrzymała "Langmuir Lecture Award", przyznaną przez Division of Colloid and Surface Chemistry, American Chemical Society.

Prof. dr hab. Andrzej Patrykiewicz ukończył studia chemiczne w UMCS (1976). Początkowo pracował w Zakładzie Fizyki Chemicznej i Fizyko-chemicznych Metod Rozdzielania, a w roku 1998 przeniósł się do ZMPF. Pracę doktorską obronił w roku 1980, kilka lat później na podstawie pracy „*Opis adsorpcji monowarstwowej gazu na homogenicznych powierzchniach ciał stałych*” (1987) uzyskał stopień doktora habilitowanego, a w roku 1998 otrzymał tytuł profesora. W latach 1978-1979 odbył staż w Tokyo Institute of Technology, potem otrzymał stypendium Fundacji Alexandra von Humboldta i pracował w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Johanna Gutenberga w Moguncji u profesora Kurta Bindera (1988-1990). Nawiązane w tym okresie kontakty zaowocowały wieloletnią współpracą, dzięki czemu także młodszy pracownicy ZMPF mogli odbywać w tym ośrodku niezwykle kształcące staże naukowe. W następnych latach prowadził badania, współpracując z naukowcami z wielu różnych placówek badawczych.

Jego badania dotyczyły przede wszystkim adsorpcji na ciałach stałych, przemian fazowych w układach jednorodnych i powierzchniowych oraz zjawiska zwilżania. Przez wiele lat swojej pracy badawczej zajmował się także licznymi, innymi zagadnieniami teoretycznymi. Opublikował ponad 240 artykułów w najpoważniejszych periodykach naukowych, w tym obszerną pracę przeglądową opartą w dużym stopniu na wynikach własnych badań, opublikowaną w prestiżowym czasopiśmie *Surface Science Reports* (*Surf. Sci. Rep.*, 2000, 37, 207). Jest również współautorem kilku rozdziałów w monografiach naukowych oraz autorem popularnego podręcznika „*Wprowadzenie do Metody Monte Carlo*” (Wydawnictwo UMCS, 1998). Wypromował czterech doktorów (Wojciech Gac, Tomasz Zientarski, Krzysztof Grabowski, Leszek Sałamacha). Kierował projektami badawczymi, między innymi koordynował grant europejski *Transfer of Knowledge “Theory and Computer Simulations of Interfacial Phenomena”* (Universidad Complutense de Madrid - Madrid, Institute of Chemical Technology - Prague, Max-Planck - Institut fuer Metallforschung - Stuttgart, Cambridge University - Cambridge, UK)

W roku 2007 Senat UMCS nadał prof. Kurtowi Binderowi tytuł doktora honoris causa, a jego promotorem był prof. A. Patrykiewicz.



Zdjęcie 6. Uroczystość nadania tytułu doktora honoris causa UMCS profesorowi Kurtowi Binderowi z Uniwersytetu Johanna Gutenberga w Moguncji w dniu 24 stycznia 2007 roku. Z lewej stoi prof. Kurt Binder, z prawej prof. Andrzej Patrykiewicz.

Photo 6. Ceremony of awarding the title of doctor honoris causa of UMCS to Professor Kurt Binder from the Johannes Gutenberg University in Mainz on January 24, 2007. On the left stands prof. Kurt Binder, on the right prof. Andrzej Patrykiewicz.

Młodsze pokolenie pracowników Zakładu stanowili: Wojciech Rżysko, Paweł Bryk, Tomasz Zientarski i Roman Zagórski.

Dr hab. Wojciech Rżysko, profesor UMCS został zatrudniony w ZMPF w roku 1994. Studia chemiczne ukończył w 1993, stopień doktora uzyskał w 1997 w oparciu o pracę „*Modelowanie procesu adsorpcji mieszanin ciekłych na ciałach stałych*”, natomiast stopień doktora habilitowanego otrzymał na podstawie rozprawy „*Symulacje Monte Carlo przemian fazowych w filmach adsorpcyjnych złożonych z dimerów i trimerów*” w roku 2010. Od 2020 jest profesorem UMCS. Otrzymał Stypendium Fundacji na rzecz Nauki Polskiej (1996). W latach 1998-1999 odbywał staż podoktorski w Narodowym Uniwersytecie Autonomicznym w Meksyku. Następnie zdobył stypendium Fundacji Alexandra von Humboldta i pracował w grupie prof. K. Bindera w Uniwersytecie Johanna Gutenberga w Moguncji (2003-2005, 2008). Współpracował także z naukowcami z innych ośrodków (np., w Instytucie Fizyki Materii Skondensowanej Ukraińskiej Akademii Nauk we Lwowie, Complutense University of Madrid).

Jego badania dotyczą głównie adsorpcji, przemian fazowych, zjawisk krytycznych samoorganizacji molekuł, nanocząstek łańkowych, polimerów oraz ich mieszanin w różnych warunkach. Jest autorem ponad 100 publikacji naukowych. Wypromował jednego doktora (Łukasz Baran).

Dr hab. Wojciech Rżysko specjalizuje się w nowoczesnych technikach symulacji molekularnych, wprowadza w tę trudną dziedzinę innych pracowników naukowych. Uczestniczył w realizacji licznych projektów badawczych, skutecznie zdobywa fundusze na rozbudowę naszego centrum obliczeniowego.

Dr hab. Paweł Bryk, profesor UMCS został zatrudniony w ZMPF po ukończeniu studiów (chemia, UMCS) w roku 1994. Pracę doktorską *“Płyny w pobliżu półprzepuszczalnych membran. Teoria i symulacje komputerowe”* obronił w 2001 roku, a stopień doktora habilitowanego otrzymał w 2008 za badania dotyczące *„Zastosowania teorii funkcjonału gęstości do opisu koloidów, polimerów i ich mieszanin”*. W latach 2001-2003 odbył staż podoktorski w grupie prof. S. Dietricha w Instytucie Maxa Plancka w Stuttgarcie. Współpracował także z innymi zespołami badawczymi. Wymienić tu można grupę prof. L. G. Mac-Dowella z Complutense University of Madrid, grupę prof. R. Rotha z Instytutu Fizyki Teoretycznej, Universitaet Tuebingen (Tybinga) oraz zespół prof. dr hab. Artura P. Terzyka z Wydziału Chemii UMK w Toruniu. Od roku 2020 jest profesorem UMCS.

Jego tematyka badawcza obejmuje głównie zastosowanie klasycznej teorii funkcjonału gęstości do opisu, płynów niejednorodnych, układów koloidalnych i polimerów, modelowanie procesu zwilżania i zamrażania wody na nowych materiałach kompozytowych, modelowanie nowych materiałów węglowych o właściwościach superhydrofilowych i superomnifobowych oraz wpływ procesu starzenia na zwilżanie powierzchni ciał stałych. Opublikował 93 artykuły. Był promotorem jednej pracy doktorskiej (Edyta Słyk).

Dr hab. Tomasz Zientarski, prof. Politechniki Lubelskiej był zatrudniony w ZMPF w latach 1998-2015. Początkowo pracował w grupie prof. A. Patrykiewicza w Zakładzie Fizyki Chemicznej i Fizykochemicznych Metod Rozdzielania, UMCS (od 1994). Stopień doktora otrzymał w roku 2000 za pracę *„Formy uporządkowania i przemiany fazowe w filmach adsorpcyjnych na powierzchniach krystalicznych”*, a stopień doktora habilitowanego w 2015 na podstawie rozprawy *„Metody symulacyjne w badaniu naprężeń występujących podczas wzrostu warstw polikrystalicznych”*. Zajmował się modelowaniem adsorpcji metodą Monte Carlo w układach siatkowych oraz badaniem przemian fazowych w układach powierzchniowych. Po pewnym czasie swoje zainteresowania naukowe skierował w stronę układów o większym znaczeniu praktycznym. Nawiązał współpracę z Katedrą Fizyki Stosowanej Wydziału Mechanicznego Politechniki Lubelskiej i podjął badania dotyczące naprężeń występujących podczas osadzania próżniowego oraz elektrolitycznego w metalicznych układach cienkowarstwowych. Jest autorem 35 publikacji naukowych. W roku 2015

wygrał konkurs na stanowisko profesora Politechniki Lubelskiej, a od 2019 roku jest tam kierownikiem Katedry Informatyki.

Dr Roman Zagórski pracował w Zakładzie w latach 1994-2001. Pracę doktorską „*Zastosowanie metod symulacji do badania płynów chemicznie niejednorodnych*” obronił w roku 2000. W tym okresie Jego badania dotyczyły modelowania reakcji chemicznych, opisu płynów asocjujących, symulacyjnego wyznaczania potencjału chemicznego. W roku 2001 przeniósł się do Gliwic, gdzie pracował na Wydziale Inżynierii Materiałowej Politechniki Śląskiej, w dziedzinie informatyki stosowanej. Jego obiecującą karierę naukową przerwała przedwczesna śmierć w roku 2012. W naszej pamięci zapisał się jako niezwykle rzetelny, pracowity i twórczy naukowiec.

Kolejne pokolenie pracowników Zakładu reprezentują dr Katarzyna Bucior i dr Leszek Sałamacha.

Dr Katarzyna Bucior była zatrudniona w ZMPF w latach 2001-2009. Wcześniej pracowała w Katolickim Uniwersytecie Lubelskim oraz w Instytucie Agrofizyki PAN. Rozprawę doktorską „*Teoria adsorpcji mieszanin dwuskładnikowych*” obroniła w roku 2006. W roku 2007 otrzymała dwuletnie stypendium Fundacji Aleksandra von Humboldta i wyjechała na staż do Moguncji. Jest współautorką 16 artykułów naukowych.

Dr Leszek Sałamacha pracował w ZMPF od 2001 do 2011, początkowo jako asystent potem na stanowisku adiunkta. Stopień doktora uzyskał w 2006, w oparciu o pracę „*Badanie struktury faz oraz przemian fazowych w układach o ograniczonej geometrii*”. W roku 2011 przeniósł się do Laboratorium Analitycznego Wydziału Chemii UMCS. Obecnie zatrudniony jest w Katedrze Informatyki Politechniki Lubelskiej. Jest autorem 10 publikacji.

Dr hab. Tomasz Staszeński podjął pracę w ZMPF w roku 2002, początkowo na etacie technicznym, potem jako pracownik naukowo-dydaktyczny, przechodząc kolejne szczeble kariery naukowej: magisterium (2003), doktorat (2010) i habilitacja (2022). Temat jego rozprawy doktorskiej brzmiał „*Cząsteczki łańcuchowe w pobliżu powierzchni ciał stałych*”. Stopień doktora habilitowanego uzyskał w oparciu o osiągnięcie naukowe „*Teoria i symulacje układów zawierających łańcuchy przyłączone do powierzchni ciał stałych i nanocząstek*”. Opublikował 41 artykułów naukowych. Jego badania dotyczą głównie adsorpcji cząsteczek łańcuchowych na powierzchniach ciał stałych, adsorpcji na szczytkach polimerowych, cząstek włochatych, cząstek Janusa oraz adsorpcji na granicy faz ciecz-ciecz. Był promotorem pomocniczym w jednym przewodzie doktorskim.

Najmłodsi członkowie zespołu to dr Edyta Raczyłło (z domu Słyk) i dr Łukasz Baran.

Dr Edyta Raczyllo ukończyła magisterskie studia z chemii (2012) i fizyki (2013). Pracę doktorską „*Struktura i przemiany fazowe w monowarstwach kopolimerów blokowych. Teoria i symulacje komputerowe*” obroniła w roku 2019. W latach 2019-2021 odbywała staż w Instytucie Chemii Fizycznej PAN w Warszawie. Zajmowała się modelowaniem adsorpcji i samoorganizacji, a ostatnio problemem dyfuzji w gęstych ośrodkach. Opublikowała 16 artykułów.

Dr Łukasz Baran rozpoczął pracę naukową już na drugim roku studiów pod kierunkiem prof. S. Sokołowskiego. Po uzyskaniu tytułu licencjata (2017) podjął studia w ramach Międzynarodowych Studiów Doktoranckich na Wydziale Chemii UMCS. W 2022 roku uzyskał stopień doktora nauk chemicznych za pracę „*Computer Simulations of the self-assembly process of various molecules with diverse architecture on solid surfaces*”. Jego opiekunem i promotorem pracy doktorskiej był dr hab. W. Rzyśko (promotor pomocniczy to dr hab. T. Staszewski). W roku 2022 został zatrudniony w Katedrze Chemii Teoretycznej.

Dr Ł. Baran jest autorem lub współautorem 22 publikacji. Był wielokrotnie wyróżniany, zdobywał nagrody naukowe i prestiżowe stypendia. Był finalistą konkursu „Złoty Medal Chemii” na najlepszą pracę licencjacką, organizowanego przez IChF PAN w Warszawie (2017), otrzymał Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla studentów za wybitne osiągnięcia naukowe (rok akademicki 2017/2018), stypendium START 2020 Fundacji na rzecz Nauki Polskiej oraz stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców w roku 2022 (realizowane do 2025 r.). Został także laureatem programu Bekker 2023 NAWA, co zapewnia Mu środki na realizację stażu podoktorskiego w grupie “Computer Simulations of Interfaces” kierowanej przez Prof. Luis G. MacDowella na Uniwersytecie Complutense w Madrycie, planowanego na lata 2024-2026. W tym samym zespole odbył już staż doktorski (2021).

Otrzymał i zrealizował dwa granty naukowe: „Diamentowy Grant” (MEN) „Symulacje komputerowe samoorganizacji wybranych cząsteczek na powierzchniach stałych” (2018-2021) oraz Preludium 20 (NCN) - “Samoorganizacja nanocząstek ‘łaciatych’ w układach o ograniczonej geometrii”.

W ZMPF zatrudnione były także dwie asystentki techniczne, mgr Wiesława Cyrankiewicz i mgr Anna Sałamacha. Zajmowały się studenckimi pracowniami komputerowymi i obsługą naszego klastra obliczeniowego. Po znacznym ograniczeniu zajęć dydaktycznych realizowanych w Zakładzie zostały one przeniesione do innych jednostek.

Przez niemal ćwierć wieku pracownicy opublikowali ponad 600 artykułów naukowych, liczne rozdziały w książkach, zrealizowali ponad 20 projektów badawczych finansowanych przez różne instytucje, w tym 2 granty europejskie, wypromowali 13 doktorów, 4 osoby uzyskały stopień doktora habilitowanego i 3 osoby otrzymały tytuły profesorskie. Czwooro pracowników zdobyło stypendia Fundacji na rzecz Nauki Polskiej, a pięcioro stypendia Fundacji Alexandra von Humboldta.

Równolegle pracownicy prowadzili zajęcia dydaktyczne z różnych przedmiotów, związanych z szeroko rozumianymi zastosowaniami informatyki w chemii (np. symulacje komputerowe, modelowanie matematyczne w badaniach środowiskowych, symulacje komputerowe w naukach przyrodniczych) oraz ze spektroskopii. Szczególnie dużo czasu poświęcono organizowaniu studiów licencjackich “Chemia informatyczna”.

W Zakładzie panowała zawsze miła, niemal rodzinna atmosfera, co sprzyjało efektywnej pracy naukowej.

3. KATEDRA CHEMII TEORETYCZNEJ



Zdjęcie 7. Pracownicy Katedry Chemii Teoretycznej (2022). W pierwszym rzędzie, od lewej: dr hab. P. Borowski, dr E. Raczylło, dr hab. K. Nieszporek, prof. M. Borówko, dr Ł. Baran, dr hab. T. Staszewski. W drugim rzędzie od lewej: dr P. Podkościelny, dr D. Nieckarz, dr hab. P. Bryk, dr hab. W. Rzyśko, prof. P. Szabelski, dr hab. M. Barczak.

Photo 7. Employees of the Department of Theoretical Chemistry (2022). Front row, from left: P. Borowski, PhD, DSc, dr E. Raczylło, K. Nieszporek, PhD, DSc, prof. M. Borówko, dr Ł. Baran, T. Staszewski, PhD, DSc. In the second row, from the left: dr P. Podkościelny, dr D. Nieckarz, P. Bryk, PhD, DSc, W. Rzyśko, PhD, DSc, prof. P. Szabelski, M. Barczak, PhD, DSc.

Od 2019 roku ponownie wszyscy teoretycy znaleźli się w jednej jednostce - Katedrze Chemii Teoretycznej, którą kieruje dr hab. Krzysztof Nieszporek, prof. UMCS. W roku 2021 do zespołu dołączyło dwóch nowych pracowników, dr hab. Piotr Borowski i dr Piotr Pikuta.

Dr hab. Piotr Borowski, profesor UMCS (magisterium – 1989, doktorat – 1995, habilitacja – 2013) w roku 1989 podjął pracę w Zakładzie Fizyki Chemicznej i Metod Rozdzielania. W latach 1990-1995 odbywał studia doktoranckie w University of Lund. Obronił tam pracę doktorską *“Theoretical studies of radicals, bi-radicals and their derivatives”*, wykonaną pod kierunkiem prof. Björna O. Roosa. Potem odbył staże podoktorskie w Pacific Northwest National Laboratory (Richland, USA) i University of Pittsburgh (Pittsburgh, USA) w ramach współpracy z prof. Kennethem D. Jordanem i dr Jeffreyem Nicholsem. Po powrocie do Polski podjął współpracę z prof. Krzysztofem Wolińskim. W roku 2013 otrzymał stopień doktora habilitowanego za osiągnięcie naukowe *„Wieloparametrowe skalowanie częstości drgań harmoniczych w spektroskopii oscylacyjnej jako alternatywa dla skalowania harmoniczych pól siłowych”*.

Jego badania skupiają się przede wszystkim wokół obliczeniowej chemii kwantowej. Dotyczą one teoretycznego opisu spektroskopii oscylacyjnej (IR i Ramana) i spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego. Prowadzi także badania dotyczące równowag klasterowych, łącząc metody termodynamiki statystycznej i obliczeniowej chemii kwantowej oraz badania z zakresu chemii strukturalnej, mechanizmów adsorpcji na funkcjonalizowanych materiałach krzemooorganicznych i węglowych i reakcji w chemii fosforoorganicznej. Brał udział w tworzeniu wielu pakietów obliczeniowych: MOLCAS, NWChem oraz PQS. Jest autorem ok. 70 prac naukowych.

Dr Piotr Pikuta (magisterium z matematyki - 1996, doktorat z matematyki - 2004) pracował początkowo w Instytucie Matematyki UMCS, gdzie prowadził badania naukowe z teorii równań różniczkowych pod kierunkiem prof. dr hab. Witolda Rzymowskiego. Zaowocowały one wykonaniem pracy doktorskiej *„Równania różniczkowe z nieciągłą prawą stroną”*. Jest autorem 13 publikacji naukowych. Pracuje w Katedrze jako starszy wykładowca, któremu powierzono prowadzenie zajęć z matematyki.

W Katedrze Chemii Teoretycznej trwają intensywne badania naukowe, pojawiają się nowe kierunki badań, rozwija się owocna współpraca z wieloma ośrodkami krajowymi i zagranicznymi. Wszyscy starają się kontynuować dobrą, ponad 45-letnią, tradycję Chemii Teoretycznej w Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej.

PIŚMIENNICTWO CYTOWANE

- [1] Wiadomości Uniwersyteckie UMCS, 2016, 2/221, 22.
- [2] M.Kosmulski, J.Narkiewicz-Michałek, M.Borówko, „Guest Editorial”, Adsorption Science and Technology, 2007, **25**, 343.
- [3] M. Borówko, J. Ilnytskyi, O. Pizio, Condensed Matter Physics, 2016, **19**, 1.

Praca wpłynęła do Redakcji 22 czerwca 2024 r.

24 czerwca 2024 roku, już po oddaniu tego manuskryptu do druku, dotarła do nas wiadomość, że zmarł prof. dr hab. Stefan Sokołowski. Nagle nauka polska i światowa straciła wybitnego fizykochemika-teoretyka, a my straciliśmy wspaniałego przyjaciela i kolegę, człowieka nietuzinkowego, pełnego pasji i empatii.