



Toruń, dn. 30 marca 2023r.

prof. dr hab. Ireneusz Grabowski
Instytut Fizyki UMK w Toruniu
ul. Grudziądzka 5/7
87-100 Toruń
ig@fizyka.umk.pl

Recenzja osiągnięcia habilitacyjnego oraz dorobku dr. Pawła Rejmaka w związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Dr Paweł Rejmak ukończył studia na kierunku chemia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie w 2003 r. W latach 2003-2008 był uczestnikiem Studiów doktoranckich w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie. W 2009 roku uzyskał stopień doktora nauk chemicznych broniąc pracę doktorską (z wyróżnieniem) zatytułowaną „*Investigation of Cu(I) Sites in FAU and MFI Zeolites and their Interactions with Small Molecules: Quantum Chemical and Hybrid QM/MM Studies*”, której promotorem była prof. dr hab. Ewa Bróćławik.

Od 2009 roku Paweł Rejmak zatrudniony był przez dwa lata na etacie technicznym w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie. W latach 2010-2013 przebywał na urlopie naukowym w związku ze stażem podoktorskim realizowanym w Donostia International Physics Center, Donostia-San Sebastian, Hiszpania. Od roku 2013 zatrudniony jest na stanowisku adiunkta w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie, w Środowiskowym Laboratorium Badań Rentgenowskich i Elektronomikroskopowych.

Osiągnięcie habilitacyjne

Osiągnięciem naukowym, które dr Paweł Rejmak przedstawił we wniosku o wszczęcie postępowania habilitacyjnego, jest cykl powiązanych tematycznie publikacji pt. „*Własności spektroskopowe i strukturalne materiałów glinokrzemianowych wyznaczone metodami obliczeniowymi*”.

Składa się on z 8 artykułów opublikowanych w renomowanych czasopiśmie naukowych o zasięgu międzynarodowym. Są to prace opublikowane głównie w *The Journal of Physical Chemistry C* oraz w *Physical Chemistry Chemical Physics*, *Chemistry of Materials* i *International Journal of Quantum Chem.* Artykuły zostały opublikowane w latach 2012 -2022, a połowa z nich powstała w ostatnich 4 latach. Sześć prac wchodzących w skład cyklu to prace współautorskie a z załączonych oświadczeń współautorów i informacji zawartych w autoreferacie, jednoznacznie wynika, że wkład habilitanta w ich powstanie był istotny i praktycznie w każdym przypadku sprowadzał się do konstrukcji modeli dla wybranych układów, wyboru metod obliczeniowych, przeprowadzenia obliczeń i analizy wyników. Prace H5 i H8 to prace jednoautorskie. Wspólnym mianownikiem wszystkich tych prac jest wykorzystanie metod obliczeniowych fizyki ciała stałego, mechaniki molekularnej i chemii kwantowej do wyznaczania własności strukturalnych i spektroskopowych serii krzemianów, glinianów i



glinokrzemianów o dużym znaczeniu praktycznym, tzn. cementów, katalitycznych zeolitów i pigmentów ultramarynowych. Podstawową metodą badawczą wykorzystywaną w tych pracach były okresowe obliczenia z wykorzystaniem metod teorii funkcjonału gęstości (DFT) głównie z gradientowymi funkcjonalami wymiennie-korelacyjnymi a w niektórych przypadkach także funkcjonalami hybrydowymi.

Oceniana rozprawa dotyczy bardzo ciekawych i praktycznych zagadnień obejmujących wsparcie eksperymentalnych badań glinokrzemianów, zaawansowanymi metodami pozwalającymi na wyznaczenie równowagowych geometrii układów, częstości harmonicznyc, stałych elastycznych oraz struktury elektronowej i wynikających z niej wielkości spektroskopowych, np. magnetycznych stałych ekranowania jąder. Takie podejście obliczeniowe pozwala zarówno na interpretację danych eksperymentalnych, jak i na uzyskanie danych niedostępnych wprost lub trudno dostępnych z eksperymentu a nawet na propozycje nowych badań eksperymentalnych.

Szczegółowa analiza wyników otrzymanych w ramach badań stanowiących podstawę osiągnięcia habilitacyjnego została przedstawiona w autoreferacie, więc nie będę jej opisywał w recenzji, tym bardziej, nie tylko opublikowano je w prestiżowych czasopismach, ale są doceniane i wykorzystywane przez środowisko naukowe (w szczególności prace H1-H3), co potwierdza ich dużą wagę naukową. Niemniej postaram się podsumować najważniejsze wyniki i osiągnięcia przedstawione w pracy habilitacyjnej.

Przede wszystkim przeprowadzono badania metodami obliczeniowymi DFT własności strukturalnych, elektronowych i spektroskopowych wybranych materiałów o dużym znaczeniu praktycznym, opartych o połączenia Si-O i Al-O: cementów krzemianowych [H1,H2,H6] i glinianowych [H3,H4], pigmentów ultramarynowych [H5,H8] oraz katalitycznych zeolitów [H7]. Wymagało to konstrukcji zaawansowanych modeli badanych układów, w większości przypadków bardzo dużych (kilkaset atomów) pozwalających na wykorzystanie adekwatnych metod obliczeniowych a następnie wybrano konkretne metody – w tym wypadku DFT z funkcjonalami gradientowymi. Wiele z tych obliczeń było pierwszymi w literaturze badaniami i symulacjami konkretnych widm, własności czy struktur cementów portlandzkich, ultramaryn czy zeolitów.

Wszystkie powyższe badania wymagały nie tylko zaawansowanej i szerokiej wiedzy zarówno z mechaniki kwantowej, klasycznej, teorii ciała stałego i chemii kwantowej, ale przede wszystkim umiejętności wykonania praktycznych obliczeń, doboru narzędzi (programów komputerowych), odpowiednich metod, w tym funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych, modelowania struktur i związków i oczywiście analitycznego podejścia do interpretacji i opracowania uzyskanych w obliczeniach wyników i porównania ich z danymi eksperymentalnymi. Podkreślić też należy bezpośrednią współpracę habilitanta z grupami doświadczalnymi.

Wydaje się, że zarówno sam dobór prac do „osiągnięcia” jak i ich prezentacja w autoreferacie zostały zrobione bardzo dobrze. Autoreferat zawiera nie tylko wprowadzenie do tematyki, motywację podjęcia badań, otrzymane wyniki czy końcowe podsumowanie, ale także habilitant szczegółowo opisuje w nim zaproponowane modele i wykorzystywane do obliczeń metody. Autoreferat jest obszerny a prezentacja, choć w wielu momentach techniczna, jest przejrzysta i zrozumiała.

Ocena pozostałej działalności naukowej

Dr Paweł Rejmak jest współautorem 28 prac naukowych, w tym czterech przed doktoratem. Wszystkie prace publikowane były w czołowych czasopismach z dziedziny fizyki lub chemii kwantowej. Warto wspomnieć, że oprócz tematyki prezentowanej w osiągnięciu habilitacyjnym, bardzo ważnym elementem badań dr Rejmaka są między innymi obliczenia przeprowadzone w ramach współpracy z WUM oraz UMCS dla kompleksów metali przejściowych o znaczeniu biologicznym.

Dr Paweł Rejmak prezentował swoje wyniki na kilkunastu konferencjach naukowych, głównie krajowych, ale także zagranicznych, w postaci referatów (8) lub posterów (15). Oprócz tego był szereg razy zapraszany na różnego rodzaju wykłady i seminaria. Dr Paweł Rejmak pięciokrotnie recenzował prace dla czołowych czasopism międzynarodowych, takich jak J. Chem. Phys. C, Nature Communications, czy Solid State Communications

Bardzo ważnym aspektem działalności naukowej Dr Pawła Rejmaka jest współpraca międzynarodowa i krajowa z renomowanymi grupami badawczymi. Wymienię tu tylko grupy prof. Andresa Ayueli z Donostia International Physics Center, San Sebastian, gdzie odbył swój trzyletni staż podoktorski, prof. Miguela Arandę z Universidad de Málaga czy prof. Martę Strugę z Warszawskiego Uniwersytetu Medycznego (badania nad nowymi substancjami farmakologicznymi) oraz prof. Wiesławę Ferenc z UMCS w Lublinie (badania kompleksowania metali przez herbicydy). Co ważne, współprace te przynosiły nie tylko publikacje, ale także nowe tematyki, metody, podejścia, czy konkretne aplikacje i zastosowania.

Warto może na koniec tej części opinii podkreślić, że po otrzymaniu stopnia doktora aktywność naukowa habilitanta znacząco się zwiększyła (cztery publikacje przed doktoratem i 24 po uzyskaniu stopnia doktora), co wskazuje zarówno na dojrzałość naukową jak i determinację dr Pawła Rejmaka w jego rozwoju naukowym.

Ocena dorobku organizacyjnego i dydaktycznego

Niestety dorobek organizacyjny dra Pawła Rejmaka nie jest zbyt imponujący. W części organizacyjnej osiągnięć wykazane zostało tylko członkostwo w Komitecie Organizacyjnym warsztatów Workshop of Molecular Simulations and Drug Design w 2015 roku (IF PAN, Warszawa). Dr Paweł Rejmak nie kierował też ani jednym grantem naukowym. Zatrudniony był jako wykonawca w ramach projektu EAgle w IF PAN.

Dorobek dydaktyczny habilitanta też nie jest zbyt duży, ale tutaj usprawiedliwieniem może być praca w jednostkach PAN. Dr Rejmak dwa razy był współopiekunem praktyk studenckich IF PAN w Warszawie, brał udział w prowadzeniu warsztatów dla uzdolnionej młodzieży szkół średnich w IF PAN a przede wszystkim był wykładowcą i prowadzącym ćwiczenia w ramach warsztatów Wien2k & Turbomole Workshop w 2015 w Barcelonie – Synchrotron ALBA.

Podsumowanie i wniosek końcowy

Podsumowując przedstawioną wyżej ocenę dorobku naukowo-badawczego, ocenę osiągnięcia naukowego w postaci jednotematycznego cyklu publikacji zatytułowanego „*Własności spektroskopowe i strukturalne materiałów glinokrzemianowych wyznaczone metodami obliczeniowymi*” oraz ocenę dorobku dydaktycznego i popularyzatorskiego oraz współpracy

międzynarodowej Pana dra Pawła Rejmaka w związku z postępowaniem habilitacyjnym prowadzonym przez Radę Naukową Instytutu Fizyki PAN w Warszawie stwierdzam, że jego dorobek naukowy wskazuje na znaczny wkład w rozwój fizyki oraz standardową aktywność naukową. Działalność dydaktyczna oraz organizatorska habilitanta nie są niestety zbyt imponujące. W szczególności brak kierowania grantami obniża moją ocenę w tym zakresie. Niemniej, wg mnie, osiągnięcia naukowe, dydaktyczne i w niewielkim stopniu organizacyjne Wnioskodawcy, spełniają kryteria określone w ustawie o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz są wystarczające do nadania mu stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie Nauki Fizyczne.

Dr Paweł Rejmak jest doświadczonym pracownikiem naukowym, prowadził badania w bardzo dobrych ośrodkach zagranicznych, współpracuje także z naukowcami z Polski z innych ośrodków niż lokalna instytucja, w której jest zatrudniony. Stwierdzam też, że dr Paweł Rejmak od chwili otrzymania stopnia naukowego doktora uzyskał istotny dorobek naukowy oraz przedstawił wartościowe osiągnięcie naukowe. Tym samym, wyrażam swą pozytywną opinię w sprawie nadania dr. Pawłowi Rejmakowi stopnia naukowego doktora habilitowanego.



Ireneusz Grabowski