



Jacek A. Majewski

+48-22-5532924; jacek.majewski@fuw.edu.pl

ul. L. Pasteura 5, 02-093 Warszawa

Warszawa, 21.04.2023r

Öcena dorobku naukowego i osiągnięcia naukowego
*Własności spektroskopowe i strukturalne materiałów glinokrzemowych
wyznaczone metodami obliczeniowymi*
dr. Pawła Rejmaka

1. Sylwetka Habilitanta

Dr Paweł Jan Rejmak odbył studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Marii Curie Skłodowskiej w Lublinie w latach 1998 – 2003 zakończone uzyskaniem tytułu magistra w Zakładzie Chemii Teoretycznej UMCS w roku 2003. Następnie w latach 2003 – 2008 odbył studia doktoranckie w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie. Stopień doktora (PhD) uzyskał w roku 2008 po przedstawieniu rozprawy doktorskiej *Investigation of Cu(I) Sites in FAU and MFI Zeolites and their Interaction with Small Molecules: Quantum Chemical and Hybrid QM/MM Studies* (w polskim tłumaczeniu recenzenta – Badania węzłów Cu(I) w zeolitach typu FAU oraz MFI oraz ich oddziaływania z małymi molekułami metodami chemii kwantowej oraz metodami hybrydowymi łączącymi mechanikę kwantową z mechaniką molekularną). Po uzyskaniu stopnia doktora rozpoczął w roku 2009 pracę w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN. Od czerwca 2010 do października 2013 odbywał staż po-doktorski w Donostia International Physics Center, Donostia (San Sebastian), w Hiszpanii. W listopadzie 2013 r rozpoczął pracę na stanowisku adiunkta w Środowiskowym Laboratorium Badań Rentgenowskich i Elektronomikroskopowych, w Instytucie Fizyki PAN, gdzie pracuje do chwili obecnej.

2. Osiągnięcie naukowe jako podstawa do uzyskania stopnia doktora habilitowanego

Dr Paweł Jan Rejmak jako podstawę postępowania habilitacyjnego przedstawił do oceny osiągnięcie naukowe zatytułowane *Własności spektroskopowe i strukturalne materiałów glinokrzemowych wyznaczone metodami obliczeniowymi* stanowiące zbiór 8 prac opublikowanych w czasopiśmie naukowych o międzynarodowym obiegu (IF w przedziale 2,44 - 11,96). Prace wchodzące do zbioru zostały opublikowane w latach 2012 - 2013 ([H1] - [H3]) oraz w latach 2017 – 2020 ([H4] - [H8]). W sześciu z 8 prac cyklu dr P. Rejmak jest pierwszym autorem, a w jednej drugim. Pięć prac cyklu ([H1] - [H4], [H6]) zawiera rezultaty badań wykonanych we współpracy z

grupą z San Sebastian, częściowo jeszcze podczas odbywania stażu po-doktorskiego. Dwie prace ([H5] i [H8]) są autorskim osiągnięciem habilitanta. We wszystkich pracach wieloautorskich dr P. Rejmak był głównym autorem części obliczeniowej, która stanowiła zasadniczą komponentę wyników badań przedstawionych w pracach cyklu. Motywem przewodnim cyklu są obliczenia teoretyczne własności bogatej rodziny glinokrzemianów, w szczególności, cementów, krystalicznych glinianów, krzemianów wapnia, nano-porowatych glinianów zawierających chromofory, czy mikroporowate zeolity. Przeprowadzenie obliczeń kwantowo-mechanicznych dla układów badanych w pracach cyklu jest dużym wyzwaniem wymagającym zaangażowania szerokiej gamy metod obliczeniowych oraz komputerów o dużych mocach obliczeniowych. W pracach cyklu habilitant przeprowadził obliczenia w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT) stosując zarówno periodyczne warunki brzegowe jak również skończone modele klastrowe, zaimplementowane odpowiednio w pakietach numerycznych takich jak QUANTUM ESPRESSO czy ORCA. W większość obliczeń DFT stosowano standardowe przybliżenia dla funkcjonału wymiennie-korelacyjnego (np. PBE), ale dla obliczeń własności spektroskopowych konieczne było zastosowanie bardziej wyrafinowanych funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych (np. hybrydowych funkcjonałów BLYP). Obliczenia stanów wzbudzonych zostały przeprowadzone w ramach zależnej od czasu DFT. Dla poprawnego opisu centrów spinowych w badanych materiałach okazało się konieczne zastosowanie metod wielokonfiguracyjnych chemii kwantowej, takich jak metoda sprzężonych klastrow (CCSD(T)) czy wielokonfiguracyjna metoda pola samo-uzgodnionego z perturbacyjnymi poprawkami drugiego rzędu (CASSCF + NEVPT2). W przypadku gdy wielkość komórki czyniła obliczenia DFT niezwykle wymagającymi pod względem czasu komputerowego, optymalizację geometrii przeprowadzono dołączając do metod kwantowo-mechanicznych metody mechaniki molekularnej opartej o empiryczne pola siłowe (VFF, ang. valence force field). We wszystkich opisanych w pracach cyklu obliczeniach teoretycznych Habilitant wykazał się bardzo dobrą znajomością *state-of-the-art* metod obliczeniowych, właściwie dobierając metodologię obliczeń do natury i skomplikowania badanego układu. Przeprowadzone solidne obliczenia wskazują interesujące fizyko-chemiczne własności badanych glinokrzemianów, rzucają nowe światło na mechanizmy fizyczne determinujące dane własności, oraz mają znaczenie dla praktycznych zastosowań badanych materiałów. Wybór prac do cyklu jest całkowicie spójny. W opinii recenzenta, przedstawiony cykl prac stanowi osiągnięcie naukowe w pełni kwalifikujące Habilitanta do nadania stopnia doktora habilitowanego.

3. Dorobek naukowy Habilitanta

Oprócz 8 publikacji cyklu, dr Paweł Rejmak jest współautorem 19 publikacji z lat 2006 - 2021 (15 publikacji po uzyskaniu stopnia doktora) opublikowanych w dobrych i bardzo dobrych czasopiśmie o obiegu międzynarodowym (IF w granicach 2.44 - 6.63). Dr P. Rejmak jest również współautorem rozdziału w książce *Handbook of Inorganic Chemistry Research*. Opublikowane prace były cytowane ok. 400 razy (bez autocytowań), a H-index autora wynosi 11. Nie jest to oszałamiająca liczba cytowań 27 prac opublikowanych na przestrzeni 16 lat, ale mieści się w

okolicach średniej liczby cytowań wykazywanej we wnioskach o nadanie stopnia doktora habilitacyjnego złożonych w Polsce. Wyniki prac naukowych Habilitanta były również prezentowane przez niego w postaci komunikatów (8) i plakatów (ponad 15) na konferencjach krajowych zagranicznych, oraz seminariach wygłoszonych w krajowych i zagranicznych instytucjach naukowych.

Chciałbym podkreślić, że metodyka stosowana w pracach Habilitanta, jest całkowicie *state-of-the-art* i prace są na wysokim poziomie. Dorobek naukowy Habilitanta stanowią wartościowe prace naukowe, w których Habilitant zademonstrował opanowanie współczesnych technik teoretycznych i obliczeniowych stosowanych do badania bardzo złożonych układów atomowych, i który znajduje moją pozytywną ocenę. Chciałbym również podkreślić, że *Autoreferat* Habilitanta (jakkolwiek nie podlega ocenie) jest dobrze napisany (opatrzone dobrymi ilustracjami) i świadczy, że Habilitant potrafi krytycznie ocenić swoje badania i przedstawić je na ogólnej platformie badań prowadzonych w dziedzinie, którą się zajmuje.

4. Osiągnięcia dydaktyczne i organizacyjne

Pewne doświadczenie dydaktyczne dr Paweł Rejmak zdobył w trakcie opieki nad praktykami studenckimi w IF PAN (w roku 2015 i 2016), prowadząc warsztaty dla uzdolnionej młodzieży (2019r), oraz prowadząc wykłady i ćwiczenia komputerowe na temat współczesnych metod obliczeniowych w czasie pobytu w synchrotronie ALBA (Barcelona, 2015r).

Habilitant brał również udział w organizacji warsztatów dotyczących symulacji molekuł i projektowania medykamentów (w 2015r), ma pewne doświadczenie w recenzowaniu artykułów w czasopiśmie, oraz w roku 2017 otrzymał nagrodę grupową Rektora Warszawskiego Uniwersytetu Medycznego za pracę opublikowaną w *J. Inorg. Biochem.*

5. Wniosek końcowy

Podsumowując, uważam, że cykl prac badawczych ([1] - [8]), jak również inne prace Habilitanta, stanowią znaczący wkład w rozwój fizyki materii skondensowanej. Dr Paweł Jan Rejmak, specjalizujący się dotychczas w atomistycznych obliczeniach złożonych układów krystalicznych i amorficznych, osiągnął już znaczną dojrzałość naukową i jest dobrze zapowiadającym się naukowcem.

Stwierdzam, że dr Paweł Jan Rejmak spełnia warunki do uzyskania stopnia doktora habilitowanego określone w ustawie z dnia 20 lipca 2018r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. 2022.574). W związku z tym popieram wniosek o nadanie Habilitantowi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.

Z poważaniem



Prof. dr hab. Jacek A. Majewski