

OCENA

osiągnięcia naukowego: „Własności spektroskopowe i strukturalne materiałów glinokrzemianowych wyznaczone metodami obliczeniowymi” oraz aktywności naukowej dr. Pawła Rejmaka w ramach przewodu habilitacyjnego

Informacje ogólne

Doktor Paweł Jan Rejmak jest absolwentem Wydziału Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie. Tytuł magistra uzyskał w roku 2003. W latach 2003-2008 dr Rejmak odbył studia doktoranckie w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni Polskiej Akademii Nauk w Krakowie, a w roku 2008 obronił z wyróżnieniem pracę doktorską uzyskując tytuł **doktora nauk chemicznych**. Praca doktorska zatytułowana: „Investigation of Cu(I) sites in FAU and MFI Zeolites and their interactions with small molecules: quantum chemical and hybrid QM/MM studies” została napisana pod opieką promotora prof. dr hab. Ewy Brocławik. Po doktoracie Kandydat był zatrudniony w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, a następnie od czerwca 2010 roku do października 2013 odbywał staż podoktorski w Donostia International Physics Center, Donostia-San Sebastián, Hiszpania. Od momentu zakończenia stażu w Hiszpanii aż do chwili obecnej, dr Rejmak jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w Instytucie Fizyki PAN w Warszawie, gdzie między innymi był wykonawcą w projekcie EAgLE (European Action towards Leading Centre for Innovative Materials) w okresie od 11.2013 do 09.2016.

Ocena osiągnięcia naukowego oraz istotnej aktywności naukowej jest sporządzona według dokumentacji, w skład której między innymi wchodzi Wniosek dr. Pawła Rejmaka z dnia 30.08.2022 o przeprowadzeniu postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne, Dane wnioskodawcy, kopia Dyplomu Doktora (w języku polskim i angielskim), Autoreferat w języku polskim i angielskim, Wykaz osiągnięć naukowych (w języku polskim i angielskim), oświadczenia współautorów, kopie publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego.

Osiągnięcie naukowe

Osiągnięcie naukowe, które Kandydat przedstawił jako podstawę wniosku habilitacyjnego, zostało zatytułowane: „**Własności spektroskopowe i strukturalne materiałów glinokrzemianowych wyznaczone metodami obliczeniowymi**”. Jest to cykl 8 powiązanych tematycznie artykułów ([H1]-[H8]), który jest przedstawiony przez dr Pawła Rejmaka w jego *Autoreferacie*. Prace z cyklu habilitacyjnego zostały opublikowane w latach 2012-2020 na łamach renomowanych czasopism naukowych takich jak: *The Journal of Physical Chemistry C* (IF: 4.177) – 4 publikacje ([H1], [H2], [H5], [H6]), *Chemistry of Materials* (IF: 10.508) – [H3], *Cement and Concrete Research* (IF: 11.958) – [H4], *International Journal of Quantum Chemistry* (IF: 2.437) – [H7], *Physical Chemistry Chemical Physics* (IF: 3.945) – [H8].

Sześć wśród prac z cyklu (tzn. [H1], [H2], [H3], [H4], [H6], [H7]) są publikacjami wieloautorskimi, natomiast dwie pozostałe [H5] i [H8] są samodzielnymi publikacjami Habilitanta. Wymagane ustawowo oświadczenia współautorów załączone do dokumentacji pozwalają stwierdzić, iż indywidualny udział dr. Rejmaka w powstaniu sześciu prac jest znaczący, a mnogość modelowanych układów oraz przeprowadzone dla tych modeli liczne obliczenia mogą świadczyć o dużej pracowitości Habilitanta.

Osiągnięcie naukowe prezentowane przez Kandydata w *Autoreferacie* dotyczy kilku ważnych materiałów, należących do ogromnej grupy materiałów glinokrzemianowych. Ogólnie materiały glinokrzemianowe są niezwykle interesujące z punktu widzenia geologii, gdyż stanowią one około 60% zawartości skorupy Ziemi. Zastosowania tej grupy materiałów sięgają czasów starożytnych i wiąże się z wieloma korzystnymi parametrami fizyko-mechanicznymi. Glinokrzemiany stanowią grupę minerałów, wykorzystywaną przez człowieka w budownictwie, można by rzec, „od wieków”. Natomiast współczesne zastosowania tej grupy materiałów dotyczy również innych obszarów działalności człowieka, takich gdzie jest wymagane zastosowanie różnego rodzaju adsorbentów, katalizatorów, przy neutralizacji pestycydów czy też innych niebezpiecznych dla środowiska substancji. Zważając na aspekty praktycznego zastosowania, można uznać, iż wybór przez Habilitanta kilku materiałów z grupy glinokrzemianów do badań za dość istotny. Wśród materiałów, którym jest poświęcony cykl habilitacyjny ([H1]-[H8]) są: wyżej wymienione cementy z zawartością krzemu (Si) i glinu (Al), pigmenty ultramarynowe oraz zeolity katalityczne. Z całą pewnością proces zrozumienia różnorodnych cech glinokrzemianów wiąże się z lepszym poznaniem zmian, zachodzących w strukturze krystalograficznej pod wpływem czynników zewnętrznych oraz ich struktury elektronowej. Podstawowe metody eksperymentalne takie jak spektroskopia wibracyjna, NMR, EPR są nieodzowne w badaniach tej grupy materiałów, choć jak zaznacza Habilitant w swoim *Autoreferacie* eksperymentalne „otrzymane wyniki są często niejednoznaczne, a spotykane

w literaturze interpretacje nierzadko arbitralne.” W pracach wybranych jako cykl habilitacyjny Kandydat skupia się na wyjaśnieniu takich niejednoznaczności posługując się metodami bazującymi na Teorii Funkcjonału Gęstości (DFT). Metody obliczeniowe DFT oraz modelowanie za pomocą mechaniki molekularnej (MM) stanowią podstawowe narzędzia w warsztacie Habilitanta.

W publikacjach [H1] i [H2] były rozpatrywane uwodnione cementy, a mianowicie uwodniony krzemian wapnia, który może być określony jako żel C-S-H ($C=CaO$, $S=SiO_2$, $H=HO_2$). Ze względu na niski stopień uporządkowania żelu C-S-H wnioski, dotyczące kilku charakterystycznych cech badanego układu w zakresie jego budowy krystalograficznej oraz wiązań chemicznych można poczynić na podstawie kilku metod eksperymentalnych (dyfrakcji, mikroskopii elektronowej, NMR). Ważną cechą związaną z krystalografią danego układu jest to, że struktura zawiera aniony krzemianowe ułożone w równoległe warstwy. Warstwy te są oddzielone od siebie nawzajem kationami Ca^{2+} oraz H_2O . Modele żelu zaproponowane w pracy [H1] mogą odpowiadać strukturze tobermorytu (14\AA) (TOB14) lub strukturze jennitu (JEN). Ze względu na niską symetrię, a tym samym złożoność numeryczną problemu przy zastosowaniu wprost jednej z metod DFT, Habilitant wprowadził pewne uproszczenia, a mianowicie posłużył się optymalizacją na poziomie mechaniki molekularnej (narzędzie GULP). W drugiej kolejności - korzystając z kodu obliczeniowego Quantum Espresso (jedna z używanych metod DFT bazująca na pseudopotencjałach i falach płaskich) oraz pakietu GIPAW - uzyskał wielkości fizyczne, które pozwoliły odwzorować odpowiedź badanych układów modelowych na pole magnetyczne przy założeniu wyżej wspomnianych struktur: typu TOB14 i JEN. Widmo jądrowego rezonansu magnetycznego (NMR) dla struktury typu TOB otrzymane za pomocą obliczeń jest bliższe eksperymentalnym wynikom spektroskopii NMR.

W pracy [H2] wyznaczone zostały wartości składowych tensora przesunięcia chemicznego δ ($\delta_{xx}, \delta_{yy}, \delta_{zz}$), δ_{iso} , anizotropii przesunięcia chemicznego dla jąder ^{29}Si , jak również analizie poddano rozkład długości wiązań Si-O w tetraedrach SiO_4 oraz momentów dipolowych, które łączą w sobie informacje o czynnikach strukturalnych i elektronowych. Dane otrzymane z obliczeń pozwalają na zidentyfikowanie położenia Si wśród najbardziej prawdopodobnych dla danego materiału, tzn. Q^1 i Q^2 . (Ogólna charakterystyka centrów Q^n jest podana w *Autoreferacie* Habilitanta).

W odróżnieniu od pierwszych dwóch prac, gdzie materiałem do badań była faza żelowa cementów portlandzkich, a wyznaczone parametry świadczyły o lokalnej strukturze substancji, w następnych dwóch pracach [H3] i [H4] Habilitant zajmował się zagadnieniami polimorfizmu i domieszkowania w krystalicznych składnikach wysokoglinowych cementów. Ogólnie badania prowadzone za pomocą metod DFT struktury sieci krystalicznych różnych odmian polimorficznych dla wielu materiałów niosą ze sobą informację o właściwościach fizycznych, chemicznych tych substancji, niejednokrotnie pomagają zrozumieć energetykę przejść fazowych. Do obliczeń przedstawionych w publikacjach [H3] i [H4] Habilitant użył metody DFT w implementacji kodu obliczeniowego SIESTA,

i w tym przypadku również konsekwentnie zastosował przybliżenie gradientowe potencjału wymiennie-korelacyjnego PBE (potencjał zaproponowany przez Perdew, Burke, Ernzerhofa). W publikacji [H4] obiektem badań był ye'elimit (YEL), który występuje jako główny składnik cementów z siarczano-glinianem wapnia, a ze względu na strukturę należy do szerszej rodziny określanej jako sodalit (SOD - $\text{Na}_8[\text{Al}_6\text{Si}_6\text{O}_{24}]\text{Cl}_2$, struktura kubiczna $P-43n$). Nominalny skład komórki ye'elimitu to: $\text{Na}_8\text{Al}_{12}\text{O}_{24}(\text{SO}_4)_2$. W zależności od temperatury w YEL'u, będącym analogiem sodalitu, mogą występować różne odmiany polimorficzne zaczynając od struktury kubicznej o maksymalnej symetrii $I-43m$, poprzez struktury tetragonalne i rombowe. Jako wejściowe dane dr Rejmak zastosował kilka struktur określonych eksperymentalnie (tzn. struktury kubiczną $I-43m$, rombową $Pcc2$, tetragonalną $P4c2$) oraz struktury, które powstają na skutek odkształceń struktury regularnej. Dzięki zastosowaniu takich odkształconych układów modelowych Habilitant otrzymał dwie dodatkowe struktury: tetragonalną $I-4$ oraz jednoskośną Cm . Dla otrzymanych nowych struktur oraz tych obserwowanych eksperymentalnie dopasowania energii całkowitych w duchu wzoru Murnghana (tzn. jednego z wielu stosowanych w fizyce równań stanu) pozwoliło na wniosek, dotyczący niestabilności struktury regularnej ze względu na odkształcenia do struktury rombowej i tetragonalnej. W pracy [H3] Habilitant wykazał możliwość występowania jeszcze jednej polimorficznej postaci ye'elimitu w formie struktury jednoskośnej o symetrii Cm . Należy zauważyć, że publikacja [H3] zawiera sporo ciekawych ewidencji i dyskusji, będących skutkiem zarówno eksperymentów przeprowadzonych przez współautorów, jak i obliczeń przeprowadzonych przez dr. Rejmaka. Rezultaty tej publikacji są bardzo wartościowe, o czym może świadczyć liczba cytowań wynosząca odpowiednio 114 (92 razy bez autocytowań) i 105 według baz Scopus i Web of Science.

W następnym artykule z cyklu Habilitant zajmuje się modelowaniem wpływu domieszkowania jonami Fe^{3+} katoidu (KAT): $\text{Ca}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_4)_{3-x}(\text{OH})_{4x}$ (gdzie $1.5 \leq x \leq 3$) na charakterystyki materiału na poziomie mikroskopowym i makroskopowym. Praca [H4] składa się z części eksperymentalnej (wykonanej przez zespół współautorów z Hiszpanii) oraz obliczeniowej, w której aktywny udział brał Habilitant. Wyznaczone zostały moduł ściśliwości objętościowej B (bulk modulus) oraz przeprowadzono optymalizację dwóch form katoidu (bez jonów Fe i z jonami Fe), uwzględniając ciśnienie hydrostatyczne. Z optymalizacji struktur płynnie wniosek o tym, że kompresja obu form katoidu następuję poprzez zmianę długości wiązań, ale nie towarzyszy temu przemieszczenie wielościanów koordynacyjnych. Efektem związanym z domieszkowaniem jonami Fe układu KAT jest wzmocnienie sieci wiązań wodorowych, przy jednoczesnym osłabieniu wiązań Ca-O. Osłabienie wiązań Ca-O objawia się poprzez przyrost średniej długości takich wiązań o 0.02 \AA oraz zmniejszenie liczby koordynacyjnej dla jonu wapnia poniżej 8. Wnioski poczynione z analizy wiązań są szczególnie przydane w dyskusji wartości makroskopowego parametru materiałowego jakim jest moduł ściśliwości objętościowej B .

Samodzielne prace Habilitanta [H5] i [H8] poświęcone są własnościom strukturalnym, optycznym i magnetycznym pigmentów typu ultramaryn. Dla tych układów Habilitant korzysta z modeli periodycznych i klastrowych. W przypadku ultramaryn Habilitant ponownie ma do czynienia z grupą materiałów, należących do glinokrzemianów typu SOD z tą różnicą, że aniony chloru są zamienione na siarki lub rodniki siarkowe, które pełnią rolę tak zwanego chromoforu odpowiadającego za kolor. Z punktu widzenia struktury elektronowej w tego rodzaju materiałach z grupami funkcyjnymi, które określane są mianem chromoforów, istotne są przejścia elektronowe, odpowiadające za długości fali w widzialnej części widma. W *Autoreferacie* dr Rejmak zwraca uwagę, że w literaturze brakuje obliczeń dla ultramaryn, w których układ traktuje się w tak zwanych „periodycznych warunkach brzegowych”. Badania opisane przez Kandydata w dwóch samodzielnych pracach stanowią ciekawe studium wielu ważnych własności związanych z chromoforami, odpowiadającymi za kolor niebieski, jak również kolor żółty ([H5]), oraz chromofor w syntetycznych czerwonych ultramarynach ([H8]). Optymalizacja dla badanych struktur, jak również obliczenia związane z drganiami sieci krystalicznej były przeprowadzone przy założeniu periodyczności układu w przestrzeni rzeczywistej (Quantum Espresso), natomiast część obliczeń, w której określano charakterystyki dla modelowanych układów ultramaryn związane z elektronowym rezonans paramagnetycznym (EPR) czy też absorpcyjną spektroskopią elektronową w zakresie nadfioletu, optycznym i bliskiej podczerwieni (UV-NIS-VIR), które wykonane były przez dr. Rejmaka z pewnym uproszczeniem geometrii układu. Zastosowano klastry, które „wycięto” ze struktur zoptymalizowanych w pierwszym kroku. Obliczenia te zostały wykonane za pomocą pakietu ORCA. Interesującym fragmentem badań przedstawionym przez Habilitanta w pracy [H5] jest odpowiedź na pytanie, dotyczące źródła uśrednionego sygnału w widmach EPR dla ultramaryn: czy powyższy fakt jest efektem mobilności rodników wewnątrz komór sodalitowych, czy może uśredniony sygnał w widmie EPR jest następstwem oddziaływania między spinami sąsiadujących rodników? Zostało pokazane, że przy modelowaniu układu dla dwóch centrów spinowych ($Na_8(S_3^-)_2 - \dots$) oraz modelowaniu z podwójną komórką ($Na_7(S_3^-) - \dots$) obliczona energia stanu tripletowego (FM) oraz singletowego (AFM) praktycznie są takie same, co można interpretować jako brak oddziaływań między centrami spinowymi. Sprawdzenie drugiej tezy wiązało się z wykonaniem obliczeń energii dla rodnika obróconego o 45° i o 90° wokół osi Y tensora g. Wybór osi Y jest związany z wartościami 2^{ch} składowych tensora rozszczepienia spektroskopowego g (g_{xx} i g_{zz}), które wyraźnie odbiegają od g_{iso} . Habilitant oszacował różnice w energiach związaną z rotacjami i tym samym pokazał, że efekty związane z dynamiką rodnika S_3^- wewnątrz struktur sodalitowych (czy też klatek sodalitowych) będą odpowiadać za różnicowanie sygnałów EPR w ultramarynach. W pracy [H8] jako cel wiodący dr Rejmak wyznaczył sobie: „rozwikłanie zagadki tożsamości chromoforu absorbującego światło o długości fali $\sim 520\text{ nm}$.” Na podstawie energetyki różnych zoptymalizowanych struktur ultramaryn, zawierających zarówno rodnik S_4^- tak i neutralną

cząsteczkę S_4 (isomery *cis*- C_{2v} , *trans*- C_{2h} itd.), obliczonych częstości kilku wariantów drgań również związanych rodnikiem i neutralną cząsteczką oraz dostępnych danych literaturowych, dotyczących spektroskopii Ramana i UV-vis Habilitant wskazuje, że najlepszym kandydatem na czerwony chromofor w ultramarynie jest izomer obojętnej cząsteczki S_4 o symetrii *cis*- C_{2v} .

W pracy [H6] zostało przeprowadzone systematyczne studium własności strukturalnych, energetycznych i wibracyjnych ortokrzemianu wapnia Ca_2SiO_4 , nazywanego w literaturze belitem. W materiale tym, jak wynika z literatury, w zakresie temperatur 500-1500° występuje co najmniej 5 odmian polimorficznych. Weryfikacja tych faz polimorficznych (w sensie optymalizacji parametrów struktury) jak również ich wzajemna relacja względem energii była przeprowadzona z poziomu metody DFT czy też „z pierwszych zasad”, jak to jest ujęte w tytule oryginalnej pracy [H6]. Obliczenia w pracy [H6] pozwoliły na uszeregowanie faz polimorficznych w następujący kolejności: γ ($Pnma$) $\rightarrow \alpha'_L$ ($Pna2_1$) $\rightarrow \alpha'_H$ ($Cmcm$) $\rightarrow \beta$ ($P2_1/c$) $\rightarrow \alpha$ ($P3m1$, $P6_3mc$). Wynik ten jest zgodny z eksperymentalnymi ewidencjami. Ze względu na dużą różnicę w obliczonych energiach (3 eV/f.u.) korzystniejsza będzie symetria trygonalna ($P3m1$) niż heksagonalna dla fazy α . Obliczenia wykonane w [H6] wskazują, iż ze względu na charakter dyspersji fononów w okolicach punktu Γ fazy γ, β, α'_L będą wykazywać stabilność. Dodatkowo obliczone krzywe dyspersji fononów w kierunku Γ -X dla faz α'_L oraz β wykazują zmiękczenie modów akustycznych, co może wskazywać na tendencje do tworzenia struktur modulowanych i tak zwanych zblźniaczeń. W przypadku fazy γ z obrazu dyspersji fononów jest widoczne sprzężenie modów akustycznych i optycznych, co jest z kolei wskazują na podatność danej fazy do przejścia fazowego.

Publikacja [H7] jest poświęcona zagadnieniu adsorpcji CO na kwasowych centrach Brønsteda w mazzycie, który jest zaliczany do materiałów z grupy zeolitów. Zeolity stanowią szeroką grupę glinokrzemianów szkieletowych, a te z nich, które występują w formach kwasowych są szczególnie interesujące ze względu na wykorzystywane ich w roli katalizatorów przy produkcji paliw. W pracy [H7] Habilitant przeprowadził optymalizację struktur, zawierających 7 różnych typów centrów Brønsteda w strukturze mazyty, następnie wyznaczył kolejność energetyczną zoptymalizowanych struktur, wartości energii wiązania CO przez centra kwasowe. Rezultaty obliczeń przyczyniły się do szerszej interpretacji wyników eksperymentalnych i przypisania dwóch pasm grup OH. Tym samym zostało ustalone, że dwa pasma obserwowane w eksperymentalnym widmie mazyty w podczerwieni (IR) pochodzą od centrów kwasowych ulokowanych w porach badanego zeolitu o różnym rozmiarze.

Podsumowując, prace [H1] - [H8] dr Pawła Rejmaka wybrane jako cykl habilitacyjny oceniam jako ważne ze względu na podjętą tematykę, a wyniki otrzymane w tych pracach i przedstawione w *Autoreferacie* za istotny i wartościowy wkład, dotyczący własności spektroskopowych i strukturalnych materiałów z grupy glinokrzemianów. Za bardzo ważną cechą podjętych przez

Habilitanta badań uważam próbę opisu wielu własności spektroskopowych wybranych glinokrzemianów z pozycji metod DFT, w którym modelowe układy były traktowane w sposób periodyczny. Pozwoliło to nie tylko na jakościowe ale również ilościowe porównanie wyników teoretycznych z eksperymentalnymi, oraz poszerzyło stan wiedzy w zakresie mechanizmów, które mogą stanowić o praktycznych zastosowaniach wielu innych materiałów z grupy glinokrzemianów.

Istotna aktywność naukowa

Obecnie całkowity dorobek publikacyjny dr. Pawła Rejmarka obejmuje 28 publikacji w czasopismach z bazy JRC (Journal Citation Report) oraz rozdział w książce „Handbook of Inorganic Chemistry Research”. Oprócz prac wchodzących w cykl habilitacyjny oraz artykułów, które pojawiły się w trakcie studiów doktoranckich, dr Rejmak był współautorem jeszcze 15 następujących publikacji, w których zajmował się zagadnieniami związanymi między innymi z kompleksami metali przejściowych o znaczeniu biologicznym, herbicydami, zeolitami itd. Dane bibliometryczne dotyczące całego dorobku publikacyjnego Kandydata są następujące: według bazy Web of Science wszystkie publikacje i rozdział w książce były cytowane 453 razy (420 bez autocytowań), co daje średni współczynnik 15.62 cytowania (14.48 bez autocytowań) na pozycję w bibliografii. Index Hirsha zarówno według bazy Web of Science jak również bazy Scopus wynosi obecnie 11. Istotny przyczynek do wartości współczynnika Hirsha dają cytowania związane są publikacjami, które powstały po uzyskaniu tytułu doktora, tj. 8 z 11 publikacji. Powyższe oznacza, że tematyka, której podejmował się Habilitant po doktoracie jest aktualna, a prace są zauważalne w środowisku naukowym.

Oceniając istotną aktywność naukową Habilitanta należy wskazać kilka ważnych faktów, dotyczących przebiegu kariery naukowej Habilitanta: Doktor Rejmak odbywał staż podoktorski w Hiszpanii w grupie prof. Andersa Ayuela (DIPC) (2010-2013), brał udział w realizacji projektu EAgle (IF PAN, 2013-2016). W ramach w/w projektu odbył wizytę w SYNCHROTRONIE ALBA i był jednym z prowadzących warsztat „Wien2k&Turbomole Workshop” (2015). W ramach działalności naukowej dr Rejmak współpracuje z grupą prof. Andersa Ayuela (DIPC, Donostia-San Sebastián, Hiszpania), prof. Miguelem Arandą (ALBA synchrotron, Barcelona, Spain), prof. Erikiem Pellegrinem (ALBA synchrotron, Barcelona, Spain), prof. dr hab. Martą Strugą (Wydział Medycyny, Uniwersytet Warszawski), dr hab. Wiesławą Ferenc (Wydziałem Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie), prof. dr hab. Ewą Broclawik i prof. dr hab. Jerzym Datką (Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, Kraków).

Jedna z prac Habilitanta (opublikowana w J. Inorg. Biochem), która powstała we współpracy z autorami z Wydziału Medycyny Uniwersytetu Warszawskiego, otrzymała nagrodę III stopnia Rektora Uniwersytetu Warszawskiego.

Doktor Rejmak jako pracownik IF PAN miał okazję być opiekunem letnich praktyk studenckich w 2015 i 2016 r. W styczniu 2019 r. prowadził warsztaty dla uzdolnionej młodzieży szkolnej pt. „Synteza bioaktywnych kompleksów metali i ich charakteryzacja za pomocą spektroskopii IR”. Podczas warsztatów „Wien2k&Turbomole Workshop” (2015) dr Rejmak wygłosił 4 wykłady tematyczne i poprowadził ćwiczenia komputerowe z obsługi pakietu Turbomole.

Dokumentacja Habilitanta zawiera informację dotyczącą aktywności w roli recenzenta (recenzje dla 5 znanych czasopism), tytuły seminariów i wykładów, które były wygłaszane w Instytucie Fizyki PAN, Instytucie Fizyki Jądrowej PAN, na Uniwersytecie Jagiellońskim, Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, podczas pobytu w DIPS, podczas warsztatu *2nd nanoIKER Workshop*. Habilitant brał udział w konferencjach krajowych i zagranicznych, podczas których przedstawiał wyniki swojej pracy naukowej i wygłosił 9 wystąpień ustnych oraz prezentował 15 plakatów.

Podsumowanie

Dorobek naukowy dr. Pawła Jana Rejmaka oceniam wysoko w części dotyczącej cyklu habilitacyjnego przedstawionego jako zbiór 8 publikacji i opisanego jako Osiągnięcie w Autoreferacie. Inicjatywy w przedmiotowym zakresie wykazane przez Habilitanta jako inne aktywności naukowe przekonują, że są to istotne przyczynki w przebiegu kariery naukowej.

Stwierdzam, że osiągnięcie naukowe i cały dorobek naukowy doktora Pawła Jana Rejmaka spełniają wszystkie wymogi ustawowe i zwyczajowe stawiane habilitacji. Wnoszę o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

M. Pugaczowa - Michalska

Dr hab. Maria Pugaczowa-Michalska