

Prof. dr hab. Jan Wąsicki
Wydział Fizyki
Uniwersytet im. A. Mickiewicza
w Poznaniu

Poznań, dnia 23 stycznia 2023 r.

Recenzja

rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego dr Pawła Rejmaka pt. „Własności spektroskopowe i strukturalne materiałów glinokrzemianowych wyznaczone metodami obliczeniowymi”.

Dr Paweł Rejmak uzyskał tytuł magistra chemii na Wydziale Chemii Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie w 2003 roku. Studia doktoranckie odbył w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie i w roku 2008 obronił z wyróżnieniem pracę doktorską pt. "Investigation of Cu(I) sites in FAU and MFI Zeolites and their Interactions with Small Molecules: Quantum Chemical and Hybrid QM/MM Studies ". Promotorem pracy doktorskiej była prof. Ewa Broclawik. W latach 2009-2010 zatrudniony był w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie, a w latach 2010-2013 odbył staż podoktorski w Donostia International Physics Center (Hiszpania). Od 2013 roku zatrudniony jest na etacie adiunkta w Środowiskowym Laboratorium Badań Rentgenowskich i Elektronomikroskopowych Instytutu Fizyki PAN.

Jako osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę habilitacji dr Paweł Rejmak przedstawił następujące publikacje:

H1. P. Rejmak, J. S. Dolado, M. J. Stott, A. Ayuela, “²⁹Si NMR in Cement: A Theoretical Study on Calcium Silicate Hydrates” *J. Phys. Chem. C* **2012**, *116*, 9755-9761,

H2. P. Rejmak, J. S. Dolado, M. J. Stott, A. Ayuela “²⁹Si Chemical Shift Anisotropies in Hydrated Calcium Silicates: A Computational Study” *J. Phys. Chem. C* **2013**, *117*, 8374-8380,

H3. A. Cuesta, A. G. De la Torre, E. R. Losilla, V. K. Peterson, P. Rejmak, A. Ayuela, C. Frontera, M. A. G. Aranda “Structure, Atomistic Simulations, and Phase Transition of Stoichiometric Yeelinite” *Chem. Mater.* **2013**, *25*, 1680-1687,

H4. A. Cuesta, P. Rejmak, A. Ayuela, A. G. De la Torre, I. Santacruz, L. F. Carrasco, C. Popescu, M. A. G. Aranda “Experimental and theoretical high pressure study of calcium hydroxyluminate phases” *Cem. Concr. Res.* **2017**, *97*, 1-10,

H5. P. Rejmak, “Structural, Optical, and Magnetic Properties of Ultramarine Pigments: A DFT Insight” *J. Phys. Chem. C* **2018**, *122*, 29338-29349,

H6. P. Rejmak, J. S. Dolado, M. A. G. Aranda, A. Ayuela, “First-Principles Calculations on Polymorphs of Dicalcium Silicate – Belite, a Main Component of Portland Cement” *J. Phys. Chem. C* **2019**, *123*, 6768-6777,

H7. P. Rejmak, J. Datka, E. Brocławik, “Identity of two types of strong Bronsted acid sites in mazzite revealed by CO probe: IR study and periodic DFT modeling” *Int J Quantum Chem.* **2019**, *119*, e25873,

H8. P. Rejmak, “Computational refinement of the puzzling red tetrasulfur chromophore in ultramarine pigments” *PCCP* **2020**, *22*, 22684-22698.

Powyższe artykuły naukowe zostały opublikowane w latach 2012-2020 w recenzowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym, ujętych w bazie Journal Citation Reports (JCR). Sześć prac jest wieloautorskich, w 4 pracach dr Paweł Rejmak jest autorem korespondującym, a w 2 jest jedynym autorem. Z oświadczeń Kandydata i współautorów wynika, że w pracach wieloautorskich (H1, H2, H3, H4, H6, H7) był głównym autorem części obliczeniowej.

Z przytoczonych danych wynika, że dr Paweł Rejmak odgrywał dominującą rolę w obliczeniach wyniki, których zostały przedstawione w powyższych artykułach naukowych.

Habilitant za pomocą metod obliczeniowych określał własności strukturalne, elektronowe i spektroskopowe następujących materiałów: cementów krzemianowych i glinianowych, pigmentów ultramarynowych i katalitycznych zeolitów. Wspólną cechą tych materiałów są występujące w nich połączenia Si-O i/lub Al-O. Badane układy posiadają różne stopnie uporządkowania od krystalicznych przez niskokrystaliczne do amorficznych.

W swoich badaniach stosował różnorodne techniki obliczeniowe przy czym podstawową były różne warianty teorii funkcjonału gęstości (DFT). Stosował modele periodyczne i klastrowe. W zależności od rodzaju problemu naukowego stosował również metody mechaniki molekularnej czy chemii kwantowej.

Jeżeli grupę badanych przez Habilitanta materiałów można by uznać za stosunkowo wąską to stanowczo nie można tego odnieść do stosowanych metod obliczeniowych, a tym bardziej do otrzymanych w ich wyniku własności fizykochemicznych.

Wynikiem wykonanych obliczeń były między innymi: widma NMR i EPR, zależność energia-objętość dla różnych odmian polimorficznych, moduły objętościowe, widma wibracyjne, dynamika sieci krystalicznej.

Zawsze punktem wyjścia w obliczeniach była wyznaczona eksperymentalnie struktura rozpatrywanego układu. Gdy tylko było to możliwe otrzymane w wyniku obliczeń parametry dr Rejmak konfrontował z wynikami eksperymentów. Jeżeli takich wyników eksperymentalnych nie było to na podstawie wykonanych obliczeń sugerował ich wykonanie (poszukiwanie fazy jednoskośnej yeelimitu, czy pomiar anizotropii przesunięcia chemicznego dla układu amorficznego).

Na szczególne wyróżnienie moim zdaniem zasługują wyniki badań nad żelem C-S-H. Badanie układów amorficznych jest zadaniem trudnym tak dla eksperymentatorów jak i dla teoretyków. Kandydat poradził sobie z tym zadaniem znakomicie obliczając widmo ^{29}Si NMR czym przyczynił się do charakteryzacji strukturalnej tego układu.

Prace wchodzące w skład osiągnięcia habilitacyjnego były cytowane 215 razy co dobitnie świadczy, że zostały zauważone przez środowisko naukowe.

Osiągnięcie habilitacyjne dr Pawła Rejmaka oceniam bardzo wysoko i uważam, że wnosi ono znaczący wkład do zrozumienia własności strukturalnych i spektroskopowych cementów, pigmentów ultramarynowych i zeolitów.

Obok 8 prac składających się na osiągnięcie habilitacyjne Kandydat jest współautorem 19 publikacji w czasopismach o zasięgu międzynarodowym opublikowanych w latach 2006-2021, z których 15 ukazało się po uzyskaniu stopnia doktora oraz rozdziału w książce Handbook of Inorganic Chemistry Research (Ed. D. A. Morrison). Wkład dr Rejmaka do tych prac polegał głównie na obliczeniach DFT, które wykonywał między

innymi w ramach programu EAgLE, w którym uczestniczył w latach 2013-2016. Na podkreślenie zasługuje fakt, że obliczenia prowadził we współpracy z ośrodkami naukowymi z kraju i z zagranicy (Instytutem Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN, Wydziałem Medycyny WUM, Wydziałem Chemii UMCS, Donostia International Physics Center, San-Sebastian, ALBA synchrotron, Barcelona).

Wszystkie prace Kandydata były cytowane 407 razy (bez autocytowań), a indeks Hirscha wynosi 11. Wyniki swoich badań prezentował na konferencjach naukowych krajowych i zagranicznych w formie ustnych komunikatów (9) oraz posterów (15).

Wygłosił 10 referatów i wykładów na zaproszenie instytucji naukowych krajowych i zagranicznych.

Kilkukrotnie został zapraszany do recenzowania prac naukowych przez redakcje uznanych czasopism naukowych.

Dr Paweł Rejmak wyróżniony został naukową nagrodą zespołową trzeciego stopnia Rektora Warszawskiego Uniwersytetu Medycznego.

Dr Paweł Rejmak posiada również doświadczenie i osiągnięcia w pracy dydaktycznej. Był współopiekunem letnich praktyk studenckich oraz prowadził warsztaty dla młodzieży szkół średnich organizowane przez Instytut Fizyki PAN. Prowadził również zajęcia w ramach warsztatów organizowanych przez ALBA synchrotron.

Reasumując, przedstawione do oceny osiągnięcia habilitacyjne oraz pozostały dorobek dr Pawła Rejmaka oceniam bardzo wysoko i uważam, że spełnia wymogi stawiane przez Ustawę o Stopniach i Tytule Naukowym. Wnioskuje zatem o dopuszczenie Kandydata do dalszego etapu przewodu habilitacyjnego.

Jana Wąnci