

Prof. dr hab. Zdzisław T. Lalowicz, prof.em.
Instytut Fizyki Jądrowej PAN
31-342 Kraków
Radzikowskiego 152

OCENA OSIĄGNIĘCIA NAUKOWEGO

„Wpływ procesu samoorganizacji cząsteczkowej na dynamikę molekularną, przewodnictwo elektryczne i własności termiczne odnawialnych żeli jonowych”

ORAZ DOROBKU NAUKOWEGO DR MICHAŁA BIELEJEWSKIEGO

W RAMACH PROCEDURY HABILITACYJNEJ

Poszukiwania materiałów o korzystnych właściwościach w zakresie organicznej elektroniki stanowią dużą, dynamicznie rozwijającą się dziedzinę badań (np. cytowane prace przeglądowe [7,8]). Elektrolity ciekłe i stałe są w powszechnym użyciu. Te ostatnie, np. polimerowe, mają jednak szereg wad.

Mając to na uwadze wybrano do badań pochodną glukopyranozy, należącą do grupy LMWG, antycypując istotną rolę wiązań wodorowych w tworzeniu trójwymiarowej struktury. W procesie żelowania dostarczono jony czwartorzędowych soli amonowych w roztworze wodnym. Szczególnie korzystne właściwości (przewodnictwo, stabilność) znaleziono dla tetrametyloamonu bromu. Wybór takiego układu supramolekularnego można uznać za innowacyjny na tle imponującej liczby doniesień literaturowych w tej tematyce, a prowadzone badania za ważne, co potwierdzają liczne cytowania.

Szeroki program badań podjętych przez habilitanta przewidywał analizę właściwości makroskopowych, takich jak przewodnictwo (z zastosowaniem metod konduktometrii TSC i klasycznej), lepkość (wiskozymetria wibracyjna), struktura układu i jej zmiany temperaturowe (metody DSC i POM) oraz dynamika molekularna i oddziaływania z zastosowaniem metod rezonansu magnetycznego i spektroskopii optycznej. Do opisu szeregu efektów zastosowano metody obliczeniowe chemii kwantowej. Istotnym celem badań stwierdzenie na poziomie molekularnym wpływu jonów na strukturę układu korzystną dla dobrego przewodnictwa elektrycznego.

Jako osiągnięcie naukowe habilitant przedstawił do oceny 10 publikacji. Pod względem założonych celów badań i zastosowanych metod publikacje te można zestawić w kilka grup tematycznych:

- Przewodnictwo – H1, H3, H4, H9,
- Dynamika molekularna – H2, H5,

- Struktura i właściwości termiczne – H6, H8,
- Oddziaływania międzymolekularne –H7, H10,
- Metody magnetycznego rezonansu –H1, H2, H10.

Bardzo starannie przedstawione w wstępach szerokie tło literaturowe w tematyce poszczególnych publikacji uważam za godne szczególnego podkreślenia.

Autoreferat habilitanta przedstawia szczegółowo wielowątkowy rozwój programu badań. Omówione zostały zastosowane metody, ich cel i otrzymane wyniki, oraz ich skorelowaną interpretację. Treść przedstawia wątki z poszczególnych publikacji i ich udział w tworzeniu kompleksowego obrazu wszystkich skorelowanych efektów we właściwościach badanych układów.

W wielowątkowym programie badawczym habilitanta chciałbym prześledzić wątek zastosowań rezonansu magnetycznego.

W publikacji H1 przedstawiono wykorzystanie sekwencji impulsów CPMG, przystosowanej autorsko do badania elektroforetycznej ruchliwości jonów. Szczegółowo przeanalizowano jej efektywność w eliminacji różnorodnych niepożądanych efektów. Pozwoliło to na bardziej niż dotychczas dokładne pomiary i poszerzyło zakres możliwych zastosowań. Metoda ta nie była stosowana w dalszym cyklu badań. Otwarte pozostaje pytanie czy i w jakim stopniu jest metoda komplementarna do termicznej konduktometrii skaningowej (TSC).

W publikacji H2 podjęto temat dynamiki cząsteczek w ograniczonej przestrzeni. Cząsteczki cieczy wypełniające porowatą strukturę przestrzenną podlegają różnorodnym oddziaływaniom z powierzchnią komór oraz posiadają swobodę przemieszczania się pomiędzy nimi. W procesie relaksacji badanego układu istotną rolę odgrywają ruchy reorientacyjne cząsteczek rozpuszczalnika oraz stochastycznie niezależne przeskoki translacyjne, wprowadzające modulację, odpowiednio, wewnętrznego oraz międzycząsteczkowego oddziaływania dipolowego proton-proton. Zastosowano metodę FFC NMR w zakresie częstotliwości 1kHz do 10MHz. Metoda ta umożliwia detekcję dynamiki w szerokim zakresie czasów korelacji, a zatem jest celowym jej stosowanie do materiałów o szerokim ich rozkładzie. Analiza wyników prowadzi do zastosowania w opisie dynamiki cząsteczek rozpuszczalnika modelu RMTD czyli zakładającego przerywania ich reorientacji w chwilowym położeniu poprzez przeskoki translacyjne. Przejrzysty wstęp teoretyczny stanowi istotny walor tej pracy. Analiza parametrycznej zależności profili dyspersji w relaksacji pozwoliła na uwypuklenie cech charakterystycznych geometrii powierzchni komór

w żelu. Praca stanowi istotny wkład we właściwości LMOG z organicznym rozpuszczalnikiem.

W publikacji H5 nie znalazłem „pomiarów czasów relaksacji FFC NMR” sygnalizowanych w opisie tej publikacji.

Celem publikacji H9 było zbadanie wpływu żelowania na wzrost przewodnictwa jonowego. W tym cel zastosowano metodę obserwacji echa w obecności impulsowych gradientów pola magnetycznego (PFGSTE). Struktura widm protonów umożliwia na analizę procesu dyfuzji zarówno dla kationów TMA^+ jak i wody. Stwierdzono występowanie wody w sferach solwatacyjnych kationów jak i swobodnej. Natomiast dla kationu TMA^+ zmierzono jeden parametr dyfuzji, Takiej samej dynamiki translacyjnej można oczekiwać dla anionu Br^- . Z kolei zastosowanie relaksometrii FFC NMR uzupełnia obraz dynamiki jonów i wody w komorach żelu. Zastosowano model RMTD dla dwu faz wody: będącej w kontakcie z matrycą żelową i swobodnej w szerokim zakresie koncentracji jonów. W obrazowy sposób przedstawiono w interpretacji wyników korelację obserwowanej dynamiki z mikroskopową strukturą matrycy żelowej, ze wskazaniem istotnych oddziaływań.

Jako *summa technologiae* może być potraktowana autorska publikacja H10. Obiektem badań była pochodna glukopyranozy, kluczowy w tych badaniach żelator o małej masie, z glicerolem jako rozpuszczalnikiem i w obecności szeregu soli amonowych (TANBr , TEABr , TBABr). W zależności od składu oraz w funkcji temperatury otrzymano dane o tworzonych strukturach, dynamice składowych układu i przewodnictwie jonowym. Komplementarne wyniki otrzymano dla badanych układów metodami termicznej skaningowej konduktometrii (TSC), spektroskopii i dyfuzometrii magnetycznego rezonansu oraz wiskozymetrii dają skorelowany obraz dynamiki i lokalnej struktury zależny od wskazanych oddziaływań, dominujących w określonym zakresie temperatury oraz proporcji składników. Podkreślono istotną rolę wiązań wodorowych np. w złożonym procesie translacyjnej ruchliwości.

Nie znaleziono materiału o potencjalnych możliwościach zastosowań, co nie znaczy że nie zbliżono się do tego celu.

Formalne przedstawienie spełnienia kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego wg. Rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa wyższego z dnia 1.09.2011 (Tryb 2011).

Jako osiągnięcie naukowe przedłożono 10 publikacji spójnych tematycznie w czasopismach o wysokim IF. Habilitant jest autorem trzech z nich (H4, H8, H10), w pozostałych jego wkład własny był wysoki i w ocenie współautorów merytorycznie ważny. Do dorobku naukowego habilitanta należy również zaliczyć 8 innych publikacji po doktoracie z istotnym jego wkładem.

Sumaryczny IF wg. listy JCR – 73.763.

Aktualna liczba cytowań – 294, bez autocytowań – 205.

Indeks Hirscha = 10.

Po doktoracie habilitant był głównym wykonawcą krajowego projektu badawczego (2011-2014), kierownikiem projektu (2014-2017) oraz głównym wykonawcą projektu Opus (2018-2021).

§4.7. I nagroda za prezentację na AMPERE NMR School 2010, Nagroda Dyrektora IFM PAN (2015), wyróżnienie w IFM PAN, wybitne osiągnięcie naukowe w PAN.

§4.8. Habilitant brał udział po doktoracie w 11 krajowych i międzynarodowych konferencjach naukowych, gdzie wygłosił 8 wykładów. Wygłosił 4 wykłady na zaproszenie w kraju i dwa w KTH, Stockholm.

§5.1. Habilitant brał udział w European Network on NMR Relaxometry EURELAX.

§5.9. Habilitant opiekował się 3 studentami na praktykach, był opiekunem i promotorem prac magisterskich, oraz promotorem pomocniczym w przewodzie doktorskim.

§5.11. Odbił staż podoktorski KTH Royal Institute of Technology, Stockholm.

§5.14. Habilitant był recenzentem licznych publikacji w 11 międzynarodowych czasopismach.

Kilka wskazań na działalność poza powyższymi schematami.

Habilitant nawiązał istotną dla przebiegu jego badań współpracę z Chemistry Department, Payame Noor University, Isfahan, Iran. Ukończył czteromiesięczne Studium Pedagogiczno-Dydaktyczne (2007 – przed doktoratem). Zaliczył studia podyplomowe (2010-2011) w Wyższej Szkole Bankowej w Poznaniu w zakresie menedżer projektu badawczo-rozwojowego.

Stwierdzam spełnienie wszystkich kryteriów obowiązującego Rozporządzenie MNiSzW (Tryb 2011). Habilitant przedstawił w interesujący sposób wyniki badań na wysokim poziomie. Wykazał wielostronną aktywność w badaniach, jak również w zakresie kształcenia się w innych dziedzinach.

Sumaryczna ocena osiągnięć naukowych habilitanta jest wysoka.

Wnioskuje o wyróżnienie habilitacji dr Michała Bielejewskiego.

Pcim, 6.03.2019

