

Prof. zw. dr hab. inż. Janusz Chruściel
Instytut Nauk Chemicznych
Zespół Inżynierii Faz Skondensowanych
Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych
Uniwersytet Przyrodniczo-Humanistyczny w Siedlcach

Siedlce 14.04.2020

RECENZJA

Recenzja monotematycznego cyklu publikacji pt. „Dynamika i zmiany strukturalne oraz towarzyszące temu łamanie symetrii w mezofazach niechiralnych molekuł ciekłokrystalicznych” przez Radę Wydziału Informatyki i Nauki o Materiałach Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach oraz całości dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego, sporządzona w związku z wnioskiem dr Katarzyny Merkel z Instytutu Technologii i Mechatroniki Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa.

Recenzję wykonałem zgodnie z decyzją Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów Naukowych, na podstawie art. 18a ust. ustawy z dnia 14 marca 2003r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule naukowym w zakresie sztuki (Dz.U. 2017 poz. 1789) w związku z art. 179 ust. 2 Ustawy z dnia 3 lipca 2018r. Przepisy wprowadzające ustawę – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. poz. 1669) powierzyły mi funkcję recenzenta rozprawy habilitacyjnej dr Katarzyny Merkel pt. „Dynamika i zmiany strukturalne oraz towarzyszące temu łamanie symetrii w mezofazach niechiralnych molekuł ciekłokrystalicznych” oraz jej pozostałego dorobku naukowego.

Informacje ogólne – przebieg pracy zawodowej i naukowej

Pani dr Katarzyna Merkel ukończyła studia w Instytucie Chemii Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach, uzyskując tytuł magistra chemii w 1997r, przedstawiając pracę magisterską pt. „Eksperymentalne metody badania równowagi ciecz – para w układach dwuskładnikowych, Promotorem pracy był prof. dr hab. Stefan Ernst.

W 1997 roku Pani Katarzyna Merkel rozpoczęła studia doktoranckie na Wydz. Mat-Fiz-Chem. Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach, które ukończyła w 2002 r. Podczas studiów doktoranckich mgr Katarzyna Merkel wykonała szereg badań nad układami ciekłokrystalicznymi w zakresie fizyki, uzyskując tytuł doktora nauk fizycznych, na Wydziale Mat-Fiz-Chem Instytutu Fizyki Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach w 2002 roku. Tytuł rozprawy doktorskiej „Analiza eksperymentalnych i teoretycznych widm FTIR i Ramana dla molekuł ciekłokrystalicznych”. Promotorem pracy był prof. dr hab. Antoni Kocot.

Habilitantka swoją pracę zawodową rozpoczęła jako nauczyciel chemii w zespole katolickich szkół ogólnokształcących w Katowicach (2001-2002) a następnie jako pracownik naukowo-badawczy odpowiednio w latach 2002-2004 (Uniwersytet w Dublinie), 2005-2008 (Zakład Biofizyki i Fizyki Molekularnej, Uniwersytet Śląski w Katowicach), 2008-2009 (Uniwersytet w Dublinie), 2010-2017 jako adiunkt w Głównym Instytucie Górnictwa w Katowicach, a od 2017 do chwili obecnej, jako adiunkt w Instytucie Technologii i Mechatroniki na Wydziale Informatyki i Nauki o Materiałach Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach.

Recenzja osiągnięć naukowych – po doktoracie:

Jak sama Pani Dr Katarzyna Merkel wskazuje, do osiągnięć naukowych, które można zaliczyć do Jej habilitacji, jest osiem publikacji oznaczonych jako od H1 do H8. Prace te

zostały opublikowane w takich czasopismach naukowych jak: *J. Chem. Phys.*, *Phys. Rev Lett.*, *Phys. Rev. E.*, *Europhys. Lett.*, oraz w jednej monografii „*Dielectric properties of liquid crystals*” (2007). Łączny Impact Factor tych prac to 23,25.

W tych pracach został określony główny cel naukowy, który Habilitantka sformułowała następująco:

„Analiza właściwości fizycznych nematycznych materiałów ciekłokrystalicznych w relacji do ich struktury, poprzez obserwacje efektów orientacyjnych oraz dynamiki procesów molekularnych i kolektywnych, mająca na celu zrozumienie natury zjawisk w nich występujących i docelowe zastosowanie ich w urządzeniach elektrooptycznych nowej generacji”.

Jak zwróciła słuszną uwagę Habilitantka, właściwości fizyczne ciekłych kryształów są głównie związane z symetrią fazową, a ich anizotropia właściwości optycznych jest sterowana przez zewnętrzne pola oraz efekty powierzchniowe, co prowadzi do dwóch zagadnień

- po pierwsze, w jakim stopniu symetria molekuł transformowana jest na symetrię fazy, obserwowanej jako właściwości makroskopowe,
- po drugie, jak zewnętrzne pola i efekty powierzchniowe wpływają na uporządkowanie, a więc na dynamikę i anizotropię właściwości fazy.

Rozwiązanie postawionych problemów wymagało zastosowania przez Habilitantkę szerokiej gamy metod pomiarowych min: spektroskopii dielektrycznej (analizy anizotropii przenikalności elektrycznej, relaksacji dielektrycznej, dynamiki molekularnych procesów relaksacyjnych), metod optycznych i elektrooptycznych, spektroskopii w podczerwieni (wyznaczanie parametrów uporządkowania w fazach nematycznych jedno- i dwuosioowych)

Szczególnie zainteresowanie Pani Dr K. Merkel wzbudziły nowo odkryte nematyczne fazy dwuosioowe i periodycznie modulowane, zbudowane z molekuł niechiralnych. Do nich można zaliczyć dendrimery (multipody), w których struktura rdzenia faworyzuje konformacje planarną (H1-H4), druga grupa to związki o zgiętym rdzeniu typu V-shape, czy też banana-like (H5, H8), trzecia grupa to materiały dimerowe (bimezogeny, H7). Jednym z najważniejszych elementów symetrii w naturze jest symetria lustrzana, której łamanie jest skutecznym sposobem wystąpienia chiralności w ciekłym kryształ. Cząsteczki tworzą wówczas struktury helikalne, które w stanie podstawowym są niechiralne, mogące łatwo ulegać zmianom konformacyjnym i przyjmować struktury chiralne w wyniku przekroczenia niskiej bariery energetycznej. Ze względu na zniekształcenie chiralne, zjawisko to nosi nazwę spontanicznego łamania symetrii.

Do największych osiągnięć Habilitantki należy zaliczyć eksperymentalne potwierdzenie istnienia dwuosioowej fazy nematycznej w multipodach w szerokim zakresie temperaturowym w pobliżu temperatury pokojowej (H1,H2). Współpraca w ramach projektu „RTN Projekt Supramolecular Liquid Crystal Dendrimers-LCDD” zaowocowała potwierdzeniem dwuosioowej fazy nematycznej w zakresie temperatur od 40°C do -15°C w molekuł o kształcie płytki z siloksanowym rdzeniem. Odkrycie to wzbudziło szerokie zainteresowanie wśród badaczy z innych ośrodków naukowych. Zostało ono potwierdzone metodą NMR przez grupę badaczy z Uniwersytetu w Lizbonie. Należy podkreślić, że niewątpliwym sukcesem Habilitantki jest ilościowe wyznaczenie własności fazy dwuosioowej nematycznej w oparciu o wyznaczenie i analizę parametrów porządku, (H1,H2).

Indukowaną (spontaniczną) dwuosiowość potwierdziła Habilitantka w mezogenach V-kształtnych („Bent-Core”) w których starała się powiązać zdolność do tworzenia się fazy dwuosiowej a kątem rozwarcia rdzenia, długością łańcuchów alkilowych czy wielkością i orientacją momentów dipolowych, (H5,H8). W niektórych materiałach parametry fazy dwuosiowej były modyfikowane prze efekty powierzchniowe (oksadiazol w rdzeniu) (H5). W tych materiałach oprócz dwuosiowej fazy nematycznej zaobserwowano pojawienie się własności ferroelektrycznych w wyniku złamania symetrii lustrzanej. Spontaniczne łamanie symetrii lustrzanej w niektórych układach prowadzi do pojawienia się nowej fazy nematycznej N_{TB} (twist-bent) w której widoczna jest modulacja kierunku direktora. Analiza dwójłomności optycznej oraz amplitud dla modów molekularnych pozwoliła Habilitantce wyznaczyć parametry uporządkowania w obu fazach nematycznych, a także określić kąt otwarcia stożka helisy w fazie N_{TB} . Jednoosiowa faza chiralna N_{TB} przechodziła stopniowo w dwuosiową fazę N_{TB} , a następnie przechodziła transformację w fazę splay-bend (N_{SB}). Wywołane polem transformacje prowadzące do tworzenia się nowych faz ciekłokrystalicznych stanowi podstawę przyszłych zmian w technologii CK.

Interesujące grupy materiałów badanych przez Habilitantkę stanowią również: dimery (bimezogeny), mogące stanowić dwuosiową matrycę oraz materiały obejmujące układy niechiralnych molekuł, które mogą tworzyć nematyczną fazę przestrzennie modulowaną - twist-bend. Jednakże materiały te wymagają dalszych badań, mam nadzieję, że zostaną dogłębnie przebadane przez Panią Merkel.

Wyniki uzyskane przez Habilitantkę z zastosowaniem szerokiego asortymentu materiałów badawczych i metod badawczych potwierdzają eksperymentalnie istnienie fazy dwuosiowej w multipodach oraz ilościowe jej określenie. Zaprezentowany wpływ pola elektrycznego na zmianę struktury faz: dwuosiowej N_B i twist-bend N_{TB} jest istotnym przełomem w badaniach materiałów funkcjonalnych i stanowi przyczynek dla opracowania technologii nowych urządzeń z wykorzystaniem tego typu materiałów.

Oprócz monotematycznego cyklu publikacji Pani dr Katarzyna Merkel jest współautorką 28-miu oryginalnych prac związanych z tematyką ciekłych kryształów. Dla każdej pracy podany jest procentowy udział Habilitantki (od 5 do 60%) i określony zakres zadań. Habilitantka jest współtwórczynią trzech projektów badawczych, jednego wdrożenia technologicznego i trzech patentów krajowych. Jest współautorką publikacji w trzech monografiach (jednej międzynarodowej, dwóch krajowych). Brała udział jako wykonawca w 15 – tu projektach, finansowanych ze środków unijnych, NCN, NCBR i innych, w jednym jako główny wykonawca i w jednym jako kierownik zadania; w trzech projektach finansowanych przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (w dwóch jako kierownik, w jednym jako wykonawca). Za szczególne osiągnięcia naukowo-badawcze wspierające innowacyjność i rozwój przedsiębiorstw działających w górnictwie w 2015 roku uzyskała nagrodę Wiceprezesa Rady Ministrów, Ministra Gospodarki Janusz Piechocińskiego. Wygłosiła 23 referaty na konferencjach zagranicznych (15) i polskich (8) oraz prezentowała wyniki w formie posterów (18)

Recenzja osiągnięć dydaktycznych i organizacyjnych.

Należy podkreślić, że dr K. Merkel bardzo często wyjeżdżała na krótkie (3-miesięczne) i długoterminowe staże naukowe, co znacznie ograniczyło możliwość prowadzenia przez nią działalności dydaktycznej. Dopiero od roku 2010, gdy podjęła pracę na stanowisko adiunkta w Zakładzie Inżynierii Materiałowej Głównego Instytutu Górnictwa, w którym pracowała niemal do końca 2017 roku, pojawiły się Jej prace dydaktyczne. Była promotorem pracy inżynierskiej i magisterskiej, prowadziła dwa wykłady i zajęcia laboratoryjne. Wygłosiła

również 10 referatów w swoich macierzystych uczelniach. Uczestniczyła w programach studenckich Erasmus 2002-2004. Brała udział w Sieci Szkolenia Badawczego EC-FP5 RTN w Dublinie w latach 2002-2004 a w latach 2008-2009 w programie EC-FP7 ICT Program w Dublinie. Uczestniczyła w trzech programach krajowych, w których współtworzyła projekty technologiczne wspierające innowacyjną gospodarkę: Program Operacyjny Innowacyjna Gospodarka 2007-2013; Program Operacyjny Inteligentny Rozwój 2016-2019; Program INNOTECH 2014-2016.

Wniosek końcowy:

Podsumowując stwierdzam, iż przedstawiona mi do recenzji dokumentacja dotycząca postępowania habilitacyjnego, jako dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego Pani dr Katarzyny Merkel spełnia wymagania stawiane przez Ustawę z dnia 14 marca 2003 roku., o stopniach i Tytule Naukowym w Zakresie Sztuki (Dz. U. z 2017 roku, poz. 1789) oraz w zakresie spełnienia przez Kandydatkę zapisów art. 16. W związku z tym stawiam formalny wniosek o przeprowadzenie dalszych czynności w celu nadania Pani dr. Katarzynie Merkel stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie Nauk Technicznych w dyscyplinie Inżynieria Materiałowa.



Prof. zw. dr hab. inż. Janusz Chruściel
tel.: +48 601 882 798, e-mail: jch@uph.edu.pl
Wydział Nauk Ścisłych UPH
Kierownik Zakładu Inżynierii Materiałowej

Wpłynęło 12.06.2020r.