

Prof. dr hab. Tomasz Martyński
Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki Technicznej
Instytut Badań Materiałowych i Inżynierii Kwantowej
Politechniki Poznańskiej

Poznań, 20 lutego 2020 r.

**Recenzja osiągnięcia naukowego Pani doktor Katarzyny Merkel
pod tytułem
„Dynamika i zmiany strukturalne oraz towarzyszące temu łamanie symetrii
w mezofazach niechiralnych molekuł ciekłokrystalicznych”
oraz pozostałego dorobku naukowego, osiągnięć dydaktycznych i organizacyjnych w
związku z wszczętym postępowaniem habilitacyjnym w dyscyplinie inżynieria materiałowa**

Recenzja została przygotowana w związku z pismem dyrektora Instytutu Inżynierii Materiałowej Wydziału Nauk Ścisłych i Technicznych Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach dr. hab. Józefa Deniszczyka, prof. PŚ z dnia 7 stycznia 2020 roku w konsekwencji decyzji Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów Naukowego z dnia 6 grudnia 2019 roku.

Sylwetka Kandydatki

Pani doktor Katarzyna Merkel uzyskała tytuł zawodowy magistra chemii po zakończonych studiach na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Śląskiego broniąc pracę dyplomową zatytułowaną „Eksperymentalne metody badania równowagi ciecz-para w układach dwuskładnikowych” zrealizowaną w Instytucie Chemii pod opieką prof. Stefana Ernsta w 1997 roku. W wyniku studiów doktoranckich prowadzonych na tym samym wydziale w Instytucie Fizyki uzyskała stopień doktora nauk fizycznych na podstawie rozprawy zatytułowanej „Analiza eksperymentalnych i teoretycznych widm IR i Ramana dla molekuł ciekłokrystalicznych” w roku 2002. Promotorem w przewodzie doktorskim pani K. Merkel był prof. dr hab. Antoni Kocot. W trakcie studium doktoranckiego prace badawcze koncentrowały się na zagadnieniach związanych z analizą dynamiki molekularnej ciekłych kryształów w funkcji temperatury za pomocą spektroskopii w podczerwieni i Ramana

wspartych obliczeniami komputerowymi widm metodami funkcjonału gęstości elektronowej (DFT).

Po uzyskaniu stopnia doktora pani K. Merkel była nauczycielką chemii w szkole ogólnokształcącej przez jeden rok a następnie odbyła dwuletni (2002 – 2004) staż doktorski w Trinity College, University of Dublin w Irlandii prowadząc prace naukowe pod opieką prof. J. K. Vija. Kontakty naukowe z prof. J. K. Vijem są kontynuowane do dzisiaj. Praca w grupie prof. Vija zaowocowała wieloma publikacjami w renomowanych czasopismach naukowych oraz licznymi kontaktami z europejskimi grupami badawczymi z wielu krajów. Te kontakty i realizowana tematyka badawcza możliwe były dzięki programowi EC-FP5 RTN sponsorowanemu przez Unię Europejską, którym kierował prof. Vij. W ramach tego projektu dr K. Merkel miała możliwość badania wielu interesujących materiałów wykazujących fazy mezomorficzne syntezowane nie tylko w Europie i w Indiach. To w tym czasie powstały istotne publikacje (H1 i H2) dotyczące dwuosioowych faz ciekłokrystalicznych. W trakcie licznych konferencji sprawozdawczych dr Merkel wygłaszała referaty i nawiązywała nowe kontakty naukowe. Dzięki współpracy w ramach projektu europejskiego odbyła kolejny staż naukowy w grupie prof. Carlosa Cruza w University of Lisbon w Portugalii. W Lizbonie dr Merkel zapoznała się z technikami badań magnetycznego rezonansu jądrowego i dyfrakcji rentgenowskiej stosowanymi do charakteryzacji ciekłych kryształów. Po zakończonym stażu w laboratorium prof. C. Cruza dr Merkel wróciła do grupy prof. J. K. Vija w roku 2003 i kontynuowała badania nad związkami dendrymerowymi a we współpracy z prof. A. Fukudą podjęła badania związków ciekłokrystalicznych tworzących fazy de Vriesa. Te prace realizowane były w ramach projektu europejskiego, w których dr Merkel wykorzystywała metody symulacji komputerowych do analizy geometrii molekuł i symulacji widm w zakresie podczerwieni oraz analizowała uzyskane wyniki z rejestrowanymi widmami IR w celu przypisania drgań występujących w badanych cząsteczkach do odpowiednich pasm w widmach. Prowadzone badania naukowe w silnych zespołach badawczych podczas staży europejskich są udokumentowane publikacjami w takich czasopismach jak np. Phys. Rev. E czy J. Phys. Chem. B, w których dr Merkel jest współautorem.

Po zakończonym stażu doktorskim w grupie prof. Vija w roku 2005 pani doktor Merkel została zatrudniona na stanowisku naukowo-badawczym w Zakładzie Biofizyki i Fizyki Molekularnej na Uniwersytecie Śląskim. Tematyka naukowa prowadzonych badań była związana z wyjaśnieniem zaburzeń metabolizmu ludzkiej tkanki kostnej. Tym problemem dr

Merkel zajmowała się do końca 2008 roku będąc wykonawcą projektu finansowanego przez KBN. W tym samym czasie aktywnie działała w zespole prof. Kocota w tematyce dotyczącej faz de Vriesa. Dr Merkel wykorzystywała swoją wiedzę i umiejętności do orientacji próbek ciekłokrystalicznych i charakteryzacji metodami spektroskopii w podczerwieni, Ramana i mikroskopii optycznej w celu określenia kąta pochylenia molekuł i polaryzacji spontanicznej.

Kolejny aktywny okres prac badawczych nad ciekłymi kryształami dr Merkel związany jest z pobytem w Trinity College w grupie prof. Vija w latach 2008 – 2010. W tym czasie była wykonawcą w międzynarodowym projekcie „Biaxial Nematic Devices – BIND” finansowanym z funduszy unijnych. Celem tego projektu było określenie uporządkowania orientacyjnego i polarnego molekuł ciekłych kryształów o kształcie banana (banana shape) i powiązaniu parametrów makroskopowych z strukturą molekularną. Prace te zaowocowały trzema publikacjami, które dr Merkel włączyła do cyklu publikacji habilitacyjnych (H5 – H7).

Przez kolejne 7 lat (2010 – 2017) dr Merkel była zatrudniona jako adiunkt w Głównym Instytucie Górnictwa. Pracowała nad palnością i termiczną degradacją biodegradowalnych materiałów polimerowych. Badania te były finansowane z różnych źródeł, w tym NCBR, MNSW oraz z funduszy unijnych, w ramach dużego konsorcjum jednostek badawczych z całej Polsk. Przedmiotem badań były między innymi porowate folie polimerowe o jedno- i dwuosiowej orientacji. Osiągnięcia z tego okresu pracy zostały zawarte w kilku publikacjach, były prezentowane na kilkunastu konferencjach i były podstawą trzech patentów. W tym okresie dr Merkel wykorzystywała swoją wiedzę i umiejętności w zakresie badań spektroskopowych w podczerwieni, rozpraszania rentgenowskiego oraz interpretacji wyników eksperymentalnych strukturalnych zmian badanych materiałów i dystrybucji zawartych w nich nanowypełniaczy.

Praca w Głównym Instytucie Górnictwa nie spowodowała zaprzestania badań materiałów ciekłokrystalicznych. Dzięki kontaktom z prof. Kocotem oraz prof. Vijem dr Merkel brała udział jako wykonawca w projektach finansowanych przez NCN a dotyczących bananowych ciekłych kryształów, uporządkowania polarnego i ferroelektryczności faz dwuosiowych. W roku 2017 dr Merkel została zatrudniona na Uniwersytecie Śląskim kontynuując prace naukowe nad smektykami typu *twist-bend* i smektykami z fazą de Vriesa. Z tego okresu pochodzą dwie prace opublikowane w Phys. Rev. E stanowiące osiągnięcie habilitacyjne H7 i H8. W ostatnim okresie badała związki ciekłokrystaliczne typu CBnCB i DTC5CN, które budzą szerokie zainteresowanie w środowisku naukowym. Dr Merkel

zaobserwowała dla tych związków mody miękkie i Goldstone'a kolektywnych ruchów molekularnych. Wyniki tych prac zostały zamieszczone w kolejnych publikacjach w czasopiśmie o wysokim współczynniku wpływu.

W ciągu 16 lat od obrony doktoratu pani dr Katarzyna Merkel bardzo aktywnie pracowała naukowo w kilku obszarach. Wspólną cechą jest stosowanie podobnego podejścia do rozpatrywanego zagadnienia naukowego – powiązania właściwości makroskopowych badanych materiałów z ich strukturą mikroskopową i cząsteczkową oraz wykorzystywanie szerokiego wachlarza metod eksperymentalnych, w tym spektroskopii w podczerwieni, rozproszenia rentgenowskiego, mikroskopii optycznej, metod wspartych obliczeniami komputerowymi. We wszystkich okresach pracy zawsze powracała tematyka związana z powstawaniem mezofaz w materiałach o złożonej strukturze cząsteczkowej. Widać, że właściwości ciekłokrystaliczne materii fascynują naukowo panią dr Merkel skoro poświęca im tyle uwagi i czasu w swej pracy naukowej.

Ocena osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę do uzyskania stopnia doktora habilitowanego

Podstawą oceny osiągnięcia naukowego zgłoszonego przez panią dr Katarzynę Merkel, zatytułowanego *Dynamika i zmiany strukturalne oraz towarzyszące temu łamanie symetrii w mezofazach niechiralnych molekuł ciekłokrystalicznych*, jako osiągnięcie naukowe w celu uzyskania stopnia doktora habilitowanego stanowi cykl ośmiu publikacji. Siedem publikacji ukazało się w renomowanych czasopiśmie z dyscypliny fizyka i inżynieria materiałowa o sumarycznym współczynniku wpływu $IF=23,25$ oraz w angielskojęzycznej monografii w postaci obszernego rozdziału. Wszystkie publikacje mają wielu autorów a dr Merkel jest ich pierwszym autorem w 5 pozycjach i drugim w 2. Cykl publikacji jest powiązany tematycznie a obszar badań zawiera się w tytule osiągnięcia. Zakres czasowy ukazania się publikacji stanowiących cykl jest bardzo duży od 2004 do 2018 roku. Nie oznacza to, że tematyka prac stała się nieaktualna lub niszowa. O aktualności i doniosłości tematyki badawczej uprawianej przez dr Merkel świadczy liczba cytowań, która w obecnym czasie osiągnęła sumaryczną liczbę sięgającą 300. Z uwagi na strukturę molekuł, jakimi zajmowała się dr Merkel, oraz występującymi termotropowymi mezofazami, istnieje wiele możliwości „konstruowania” nowych związków o interesujących właściwościach fizycznych i chemicznych co prowadzi czasami do zaskakujących nowych odkryć. Złożona struktura

cząsteczek, które nie można przybliżyć prostym kształtem cylindrycznym a składająca się z kilku wyraźnie rozróżnialnych części powoduje, że określenie porządku molekularnego musi odnosić się do poszczególnych składowych cząsteczek. Istnieje zatem wiele możliwości zmian struktury cząsteczek, które będą miały wpływ na makroskopowe uporządkowanie a co za tym idzie właściwości fizyczne uporządkowanych cieczy.

Część merytoryczną autoreferatu zawartą na 35 stronach stanowi szczegółowy opis uzyskanych rezultatów wieloaspektowych badań kilku rodzajów materiałów ciekłokrystalicznych. Autorka określa je jako: 1) – dendrymery (multipody), 2) – molekuly o zgiętym rdzeniu (banano-podobne) i 3) – dendrymery (bimezogeny). Autoreferat ma charakter krótkiej monografii podsumowującej wyniki zawarte w habilitacyjnym cyklu 8 publikacji z podaniem celu i motywacji podjęcia badań.

Celem było powiązanie struktury molekularnej badanych związków z spontaniczną organizacją faz pojawiających się w funkcji temperatury a następnie z makroskopowymi anizotropowymi właściwościami w szczególności elektro-optycznymi z powodu perspektywicznych zastosowań w optoelektronice. Dla realizacji celu konieczne było stosowanie wielu technik eksperymentalnych i obliczeń numerycznych. Dr Merkel stosowała polaryzacyjną mikroskopię optyczną, spektroskopię w zakresie podczerwieni i Ramana, rozpraszanie promieni rentgenowskich i spektroskopię dielektryczną. Analizę konformacji badanych molekuł oraz występujących drgań molekularnych i ich wpływu na widma w podczerwieni przeprowadzała na podstawie obliczeń kwantowo-mechanicznych. Bardzo ważnym osiągnięciem naukowym jest wykazanie istnienia dwuosiowych faz nematycznych oraz konstrukcja wyświetlacza ciekłokrystalicznego wykorzystującego dwuosiowy nematyk. Dr Merkel wykazała doświadczalnie, że czasy reakcji takiego modulatora optycznego (wyświetlacza ciekłokrystalicznego) są bardzo krótkie. Istnieje jednak do analizy drugi istotny parametr związany z kontrastem optycznym. Zapewne trudności techniczne związane z uporządkowaniem warstw ciekłego kryształu w komórce oraz sterowaniem polem elektrycznym powodują, że tego typu wyświetlacze nie opanowały rynku komercyjnego. Publikacja H2 opisująca dwuosiowość ma największą liczbę cytowań (181) ale trochę wcześniejsza publikacja w tym samym czasopiśmie autorstwa grupy prof. Samuskiego jest cytowana 450 razy. Oba zespoły pracowały równocześnie i niezależnie i obu można przypisać prymat odkrycia. Eksperymentalne wykazanie istnienia dwuosiowości w warstwach ciekłych kryształów, efektu wiele lat wcześniej przewidywanego teoretycznie jest niezaprzeczalnie

dużym osiągnięciem naukowym. Udział pani dr Merkel w ilościowym opisie dwuosowości w termotropowych nematykach należy ocenić bardzo wysoko. Było to możliwe dzięki pobytowi w grupie prof. Vija ale również dzięki posiadanej wiedzy i umiejętnościom eksperymentalnym. Już samo przygotowanie próbki do badań jest dużym wyzwaniem a umiejętność wytwarzania powtarzalnych dobrze uporządkowanych próbek wymaga wieloletniego doświadczenia. Badanie zjawiska dwójłomności zajmowało dr Merkel przez długi czas. W cyklu publikacji habilitacyjnych prace H1 – H6 dotyczą tej tematyki a w ogólnym dorobku publikacyjnym jest ich więcej.

Dwie ostatnie prace z cyklu (H7 i H8) dotyczą właściwości bardzo interesujących związków wykazujących temperaturowe fazy mezoformiczne a mianowicie związki złożone z dwóch części jedna o budowie kalamitycznej połączona z drugą cząsteczką kalamityczną lub dyskotyczną. Organizacja molekularna tego typu cząsteczek jest obecnie bardzo intensywnie badana ponieważ w tych materiałach pojawia się wiele efektów wynikających z wzajemnych oddziaływań i różnych orientacji obu części takiej złożonej cząsteczki. Odzwierciedla się to np. w zmianie znaku anizotropii w funkcji częstotliwości przykładanego pola elektrycznego. Wiedza i doświadczenie i dr Merkel pozwoliły na głębszy wgląd na poziomie molekularnym w zachodzące zjawiska. Metody eksperymentalne poszerzone zostały o obliczenia i symulacje komputerowe w oparciu o różne modele. W publikacji H8 dr Merkel jest pierwszym autorem i autorem korespondencyjnym.

Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Pani dr Merkel ma doświadczenie dydaktyczne w prowadzeniu zajęć kursowych na dla studentów. Brak dużych wykładów monograficznych czy ogólnego kursu z fizyki, chemii czy inżynierii materiałowej można wytłumaczyć długimi pobytami zagranicznymi oraz zmianą miejsc zatrudnienia. W wykazie osiągnięć dydaktycznych (zał. 4) są wymienione wykład z nauki o materiałach i materiałów inteligentnych w latach 2017–2019 ale nie ma danych o liczbie realizowanych godzin ani kierunku studiów i semestrze. Niewątpliwie dr Merkel posiada duże doświadczenie w pracy z doktorantami, którymi opiekowała się w Polsce i za granicą. Wprowadzanie w arkana sztuki eksperymentalnej młodego człowieka (doktoranta) wymaga dużej wiedzy i umiejętności w tym dydaktycznych. W przedstawionej dokumentacji są wymienione liczne osoby, którymi się opiekowała wraz z opisem własnej roli. Szkoda, że

poświęcając dużo czasu i przekazując wiedzę dr Merkel nie była ani razu promotorem pomocniczym.

Udział dr Merkel w promocji nauk ścisłych i wiedzy jest udokumentowany cyklem wykładów z chemii na kursach przygotowawczych na studia. Brała udział w telewizyjnych programach popularno-naukowych i lekcjach fizyki i chemii w szkołach podstawowych.

Do organizacji nauki zalicza się uzyskiwanie finansowania prac badawczych i organizacji konferencji naukowych. Pani dr Merkel była głównym wykonawcą i wykonawcą w wielu projektach badawczych w tym finansowanych w ramach programów Unii Europejskiej. W przedstawionej dokumentacji określa także swój udział w pisaniu projektów, których kierownikami byli szefowie grup badawczych. Była też kierownikiem projektów realizowanych w Głównym Instytucie Górnictwa. Brała udział w organizacji cyklu krajowych konferencji w latach 2003-2008 oraz 9th ILCC–FLC2003.

Uwagi końcowe

Z serii ośmiu publikacji naukowych stanowiących osiągnięcie habilitacyjne dr Merkel w przeprowadzanej obecnie procedurze sześć było podstawą do poprzedniego procesu habilitacyjnego, w której cykl składał się z 9 publikacji. W obecnym cyklu dr Merkel nie ujęła prac opublikowanych w *Ferroelectrics* (2004), *Phase Transitions* (2013) i *Appl. Phys. Lett.* (2016). Zastąpiły je publikacja w *J. Chem. Phys.* z 2004 roku (H1) i *Phys Rev. E* z 2018 roku (H8). Domniemaną intencją zmian nie jest ich zawartość merytoryczna a zestaw autorów i ich rola w opisanym osiągnięciu naukowym. Obecnie przedstawiony do oceny cykl publikacji wydaje się dobrze przystawać do postawionego celu i tytułu osiągnięcia. Wyniki badań w jakich brała udział dr K. Merkel mają duże znaczenie poznawcze oraz aplikacyjne i stanowią znaczące osiągnięcie naukowe. Prace eksperymentalne przeprowadzono stosując wiele zaawansowanych technik pomiarowych, w których dr Merkel jest specjalistką. Na podkreślenie zasługuje wykorzystanie obliczeń numerycznych wspomagających interpretację uzyskanych wyników. Połączenie umiejętności wykonywania skomplikowanych pomiarów z obliczeniami komputerowymi nie jest częste i należy docenić osiągnięcia dr Merkel na obu polach. Zapewne osiągnięcie takiego poziomu było możliwe dzięki długoletniej pracy dr Merkel w grupie prof. Vija w Irlandii oraz w znanej ze swoich osiągnięć grupie prof. A. Kocota. Praca w obu tych zespołach badawczych umożliwiła uczestnictwo w programach Unii Europejskiej co sprzyjało budowaniu szerokich kontaktów międzynarodowych.

Przesłana dokumentacja do oceny dorobku zawodowego pani dr K. Merkel jest bardzo obszerna i wyczerpująca. Szczegółowo wymienione są wszystkie publikacje, referaty i plakaty konferencyjne, projekty badawcze oraz rola i udziały dr Merkel w osiągnięciach będących rezultatem badań. Pani dr Merkel bardzo skrupulatnie omówiła swój udział w publikacjach cyklu habilitacyjnego oraz pozostałym dorobku publikacyjnym, patentowym, udziału w realizacji licznych projektów badawczych, ekspertyz oraz prowadzonych zajęć dydaktycznych i promocji nauki. Rolę dr Merkel w opublikowanych osiągnięciach naukowych określili również współautorzy. Oświadczenia wydają się być spójne. Całkowity udział dr Merkel w cyklu publikacji sama Habilitantka ocenia na około 50%. Doniosłość odkryć naukowych i poziom publikacji w renomowanych czasopismach pozwalają uznać przedstawiony dorobek habilitacyjny (H1 – H8) za spełniający wymogi do uzyskania stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie inżynieria materiałowa.

Od czasu złożenia dokumentów przez panią dr Merkel w pierwszym procesie habilitacyjnym, to jest od czerwca 2017 roku do chwili obecnej, baza SCOPUS wykazuje 5 kolejnych publikacji z czego 4 dotyczą ciekłych kryształów. We wszystkich czterech publikacjach dr Merkel jest pierwszym autorem i autorem korespondencyjnym. Czasopisma te mają duży współczynnik wpływu i zaczynają być cytowane (np. Phys. Rev. E, 2018 – 6 cytowań). W pracy w Phase Transitions (2018) dr Merkel jest jedynym autorem. Prawdopodobnie publikacja w Phys. Chem. Chem. Phys. z 2019 roku będzie częściej cytowana ze względu na doniosłość doniesienia. Publikacje te wskazują na rosnącą aktywność naukową dr Merkel.

Biorąc pod uwagę wszystkie aspekty działalności pani dr Merkel można stwierdzić, że dorobek ten spełnia ustawowe kryteria osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego (Dz. U. 2017, poz. 1789). Wnoszę o dopuszczenie pani dr Katarzyny Merkel do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego i stawiam wniosek o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk technicznych, dyscyplinie inżynieria materiałowa.

Tomasz Jędrzejko