

dr hab. inż. Radomir Jasiński, prof. nadzw. PK
POLITECHNIKA KRAKOWSKA
Instytut Chemii i Technologii Organicznej
31-155 KRAKÓW, Warszawska 24
email: radomir@chemia.pk.edu.pl

Kraków, 28.08.2015r

RECENZJA

pracy doktorskiej mgr Jacka Bagniuka

pt.:

„Nowoczesne metody spektroskopowe w zastosowaniu do nieinwazyjnej i mikroinwazyjnej analizy papieru”

Papier znany był już w starożytnych Chinach i szybko zdobył uznanie jako bardzo wygodny nośnik informacji. Popyt na ten materiał nieustannie rośnie. Światowa produkcja papieru przekracza obecnie 300mln ton rocznie. Jego produkcją zajmuje się prawie 9tys zakładów przemysłowych na świecie. Papier nie jest przy tym nośnikiem odpornym na procesy starzenia. To z kolei stymuluje rozwój kolejnego sektora gospodarki, ukierunkowanego na technologie eksploatacji, konserwacji i renowacji papieru. W zarysowanych uwarunkowaniach osadzona jest tematyka przedłożonej mi do recenzji pracy doktorskiej mgr Jacka Bagniuka. Praca ta liczy 113 stron, z czego 73 strony liczy część zawierająca opis i dyskusję wykonanych prac eksperymentalnych. Nie jest to zatem dysertacja „przegadana”, sztucznie napompowana potokiem zupełnie niepotrzebnych informacji zaczerpniętych z literatury.

Pierwszych osiem stron przeglądu literaturowego Doktorant poświęca budowie i metodom otrzymywania papieru. To z kolei stanowi dobre wprowadzenie do analizy chemicznej natury procesów starzenia papieru, której Doktorant poświęca kolejny fragment studium. Mam wszakże pewne, merytoryczne zastrzeżenia do dyskusji zaczerpniętych z literatury danych. I tak np. wg schematu 1.5 (str. 16) konwersja struktury „a” w „b” odbywa się jako bimolekularny proces addytywny, zaś reakcja odwrotna, w konsekwencji przyłączenia cząsteczki wody. Prawidłowy zapis powinien być inny: reakcja z „a” do „b to przejście z eliminacją cząsteczki wody, zaś reakcja odwrotna z jej wprowadzeniem. Idąc

dalej, nie rozumiem – w świetle przeprowadzonej dyskusji - pojęcia „rodniki wprowadzone do papieru”. Na Schemacie 1.6 zasygnalizowana jest konwersja rodników alkoksyłowych w grupy karboksylowe. Jednak nie sposób domyślić się jak miałyby się ona dokonać. Wydaje się, że użytecznym byłoby zasygnalizowanie mechanizmu otwarcia pierścienia na schemacie 1.7 (przejście „f” w „g”). Wyjaśnienia wymaga też – dla mnie kompletnie niezrozumiałe – stwierdzenie „Dwie główne ścieżki degradacji chemicznej są zależne i wzajemnie się katalizując”.

Na dalszych kartach pracy Doktorant opisuje wyniki swoich prac eksperymentalnych. W badaniach tych – co zasługuje na uznanie - umiejętnie połączył szerokie spektrum metod eksperymentalnych z wynikami obliczeń kwantowochemicznych zrealizowanych z użyciem zaawansowanych teoretycznie metod opartych na teorii DFT. Zastosowane metody spektralne zaprezentowane są w sposób czytelny i nie ma wątpliwości, że do rozwiązania zarysowanego problemu zastosowane adekwatne techniki badawcze. Pewne niedopowiedzenia pojawiają się przy opisie teoretycznego warsztatu pracy. I tak np. na stronie 36 znajdujemy informację o tym, że „obliczenia wykonano metodą DFT”. Jest to dość niefortunne sformułowanie. Należałoby powiedzieć, że obliczenia wykonano metodą opartą na teorii funkcjonałów gęstości (DFT). W kolejnych wierszach dysertacji pojawia się informacja nt użytego funkcjonału, ale nie ma ani słowa o tym, w której bazie funkcyjnej prowadzono obliczenia. Nie wiadomo też dlaczego Doktorant zdecydował się na wykonanie obliczeń na tym akurat, a nie innym poziomie teorii. Z drugiej strony, w literaturze pewnościami istnieje sporo przykładów zastosowania różnych metod obliczeniowych do analizy właściwości fizykochemicznych związków podobnych do badanych przez Doktoranta.

Na stronie 64 rozpoczyna się analiza mająca wskazać najbardziej prawdopodobne kierunki utleniania celulozy. W tym celu, opierając się na danych obliczeń kwantowochemicznych, Doktorant wykonuje analizę termodynamiczną różnych, teoretycznie możliwych kierunków konwersji układu wyjściowego. Jak sam słusznie zauważa, analiza taka niekoniecznie prowadzić musi do wniosków odpowiedni korelujących z realnie realizującymi się kierunkami konkretnych reakcji chemicznych. Do tego celu należałoby bowiem zbadać kinetykę procesu, co z kolei wymagałoby zlokalizowania i zweryfikowania wszystkich punktów krytycznych na ścieżkach rozpatrywanych reakcji. W mojej ocenie byłby to problem na zupełnie osobną dysertację doktorską, co polecam gorącej uwadze zespołowi Pani Profesor. Dobrym natomiast, i stosunkowo nietrudnym w wykonaniu byłoby studium oparte na analizie deskryptorów reaktywności. Podejścia tego rodzaju rozwijają się w ostatnim

czasie bardzo intensywnie i nie wymagają aż tak kosztownych i długotrwałych obliczeń. Wystarczą do tego celu zoptymalizowane struktury stanów stacjonarnych reagentów.

Na stronie 67 Doktorant interpretuje teoretyczne symulacje widm UV badanych związków. Studiując tą część dysertacji zastanawiałem się, na jakiej podstawie poszczególnym pasmom przypisane zostały określone przejścia elektronowe. Czy są to przypuszczenia oparte na danych literaturowych, czy też informacje oparte na danych obliczeń kwantowochemicznych? Krótki komentarz na ten temat byłby w tym miejscu zdecydowanie wskazany.

Zasygnalizowane wyżej problemy nie umniejszają wysokiego, merytorycznego poziomu dysertacji. Podjęte przez Doktoranta badania są solidnie osadzone w konkretnych zagadnieniach aplikacyjnych, wykonane zostały przy użyciu bogatego wachlarza komplementarnych technik badawczych i dają możliwość formułowania wniosków o charakterze ogólnym.

W przedłożonej mi dokumentacji brak jest niestety informacji o dorobku naukowym Doktoranta, jaki zwyczajowo zestawie się w postaci aneksu do Dysertacji. Jest to o tyle zadziwiające, że Doktorant absolutnie nie ma się czego wstydzić – wręcz przeciwnie (!). Wg bazy SCOPUS jest współautorem 8 publikacji, w tym siedmiu zagranicznych, opublikowanych w markowych periodykach indeksowanych na liście filadelfijskiej jak. np. *Physical Review* (IF=3,736), *Applied Physics* (IF=1,704).

Reasumując, stwierdzam, że przedłożona mi do recenzji dysertacja doktorska mgr Jacka Bagniuka spełnia warunki określone w art.13 ustawy z dnia 14 marca 2003 o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. 2003r., nr.65 poz.595 z późniejszymi zmianami). Mając powyższe na uwadze wnioskuję o dopuszczenie Doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Ponadto, mając na uwadze poziom naukowy i jakość dysertacji oraz dorobek naukowy Doktoranta wnoszę o wyróżnienie pracy.


dr hab. inż. Radomir Jasiński, prof. nadzw. PK