

Prof. dr hab. inż. Danuta Żuchowska
ul. ks. K. Damrota 39 m 6, 50-306 Wrocław

Wydział Chemiczny
Politechnika Wrocławska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

OCENA
rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego
dr inż. BEATY MISZTAŁ-FARAJ
w związku ze wszczęciem postępowania w sprawie nadania
stopnia naukowego doktora habilitowanego

Informacje ogólne

Dr inż. Beata Misztal-Faraj ukończyła studia w 1991 r. na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Warszawskiej, stopień magistra i tytuł zawodowy inżyniera uzyskała na podstawie pracy magisterskiej pt. „*Otrzymywanie i badanie właściwości elektrycznych szklistych przewodników układu $Na_2O-B_2O_3-V_2O_5$* ”. Przed ukończeniem studiów odbyła 4. miesięczną praktykę zawodową w Philips Lightening w Holandii. W 1996 r. rozpoczęła studia doktoranckie na Politechnice Warszawskiej, które zakończyły się obroną pracy doktorskiej pt. *Badanie zjawisk związanych z transportem jonów litu w elektrolitach polimerowych* w 2001 r., promotorem był prof. dr hab. Franciszek Krok i uzyskała stopień doktora nauk fizycznych. Praca doktorska została wyróżniona przez Radę Wydziału Fizyki PW.

Habilitantka zatrudniona była w latach 2001 – 2011 na stanowisku adiunkta w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie, a od października 2011 r. do chwili obecnej na stanowisku specjalisty.

Ocena pracy naukowej zatytułowanej

Modelowanie kinetyki krystalizacji polimorficznej i płytkowej w polimerach
stanowiącej tematykę rozprawy habilitacyjnej opartej na cyklu 4 jednotematycznych publikacji w czasopismach z listy Journal of Citation Index.

Zagadnienia stanowiące tematykę rozprawy habilitacyjnej zostały omówione w trzech publikacjach, które ukazały się w Journal of Materials Research (IF=1, 434) oraz w jednej publikacji w Journal Applied Polymer Science (1,289). Trzy artykuły są współautorskie z prof. Andrzejem Ziabickim i jeden jest jednoautorski Habilitantki w Journal of Materials Research. Sumaryczny Impact Factor 4 publikacji wynosi 5,591.

Celem badań było opracowanie dwóch modeli kinetycznych krystalizacji: jednego modelu polimorficznych przejść fazowych oraz drugiego modelu dwuwymiarowego krystalizacji polimerów. Kinetykę analizowano w warunkach izotermicznych w różnych temperaturach.

Założenia teoretyczne modelu polimorficznych przejść fazowych są autorstwa prof. Andrzeja Ziabickiego. Udział Habilitantki w tych pracach polegał na obliczeniach numerycznych, badaniach eksperymentalnych oraz na aktywnym udziale w dyskusjach wyników. Wyniki tych badań są opublikowane w trzech współautorskich z A. Ziabickim artykułach. W jednym artykule dr B. Misztal-Faraj jest pierwszym autorem (publikacja H2 wg autoreferatu).

Podstawą modelu polimorficznego są rozważania przejść wielofazowych kontrolowanych zarodkowaniem. Przeanalizowano termodynamiczne przejścia fazowe w trójfazowym układzie polimorficznym. Do obliczeń numerycznych konieczne było wyprowadzenie wzorów na szybkość zarodkowania, szybkość wzrostu kryształów i składu fazowego układu wyrażonego za pomocą charakterystyk materiałowych takich jak: energia aktywacji, ruchliwość molekularnej, ciepło (entalpia), entropia przemiany, napięcie międzyfazowe, stężenie zarodków nukleacji predeterminowej. Dane te zaczerpnięte zostały z wcześniejszych prac, których Habilitantka była współautorką. Za pomocą obliczeń numerycznych określony został zakres temperatury, w której bezpośrednia przemiana fazy amorficznej w metastabilną stałą β i stabilną fazę stałą α jest szybsza niż przejście polimorficzne $\beta \rightarrow \alpha$. Inne ważne stwierdzenia to takie, że w przypadku przejść polimorficznych w całym zakresie temperatur dominuje zarodkowanie sporadyczne oraz, że za pomocą modyfikacji charakterystyk materiałowych można wpływać na kinetykę krystalizacji polimorficznej. Habilitantka brała aktywny udział w dyskusjach nad modelem a przeprowadzone przez nią obliczenia numeryczne przyczyniły się do powstania udoskonalonego modelu opisujących przemiany w układach wielofazowych.

Badania prowadzone w zespole zainspirowały dr B. Misztal-Faraj do opracowania innego własnego modelu. Zaproponowała prosty kinetyczny model krystalizacji płytkowej uwzględniającej szybkość pierwotnego zarodkowania i szybkość wzrostu płytek. Przeprowadziła obliczenia numeryczne i ich analizę. Wyniki badań zawarte są w obszernej publikacji autorki w *Journal of Materials Research*, 2013, p.1224-1238, (H4).

Proponowany przez Habilitantkę kinetyczny model krystalizacji płytkowej jest oparty na dwuwymiarowym zarodkowaniu pierwotnym i wzroście płytkowych zarodków w kierunku prostopadłym do łańcucha polimeru. Omówiła rozwój składu fazowego dla

układu dwufazowego (faza amorficzna i faza płytkowa w stanie stałym) i czterofazowego (faza amorficzna i trzy fazy płytkowe w stanie stałym). Założenia projektu są takie, że:

- faza amorficzna, jako prekursor płytek zawiera asymetryczne elementy kinetyczne – prostopadłościany o podstawie kwadratu i wysokości równej grubości płytkowych kryształów docelowych,
- w fazie amorficznej występują elementy kinetyczne o różnych wysokościach,
- fazy płytkowe wykazują różne entalpie – tym wyższe im płytki są cieńsze,
- stałą entropię fazy płytkowej.

Na podstawie opracowanego modelu można przewidzieć szybkość krystalizacji w funkcji czasu. Model zweryfikowała w oparciu o dane eksperymentalne uzyskując dobrą zgodność. Dane eksperymentalne zaczerpnęła z pracy współautorskiej opublikowanej w *e-Polymers* 2010, (D4), w której była współautorką.

Analiza modelu i wyniki obliczeń numerycznych pozwoliły na określenie grubości kryształów płytkowych $l(v_{max})$, które powstają najszybciej w fazie amorficznej. Zakres grubości płytek powstających w procesie krystalizacji płytkowej kontrolowanej zarodkowaniem jest ograniczony temperaturą krystalizacji. Stwierdziła, że podczas izotermicznej krystalizacji w niższej temperaturze szybciej powstają kryształy grubsze. W wyższej temperaturze grubość płytek charakteryzuje się maksymalną szybkością tworzenia, dzieląc zakres grubości na dwie części: poniżej grubości charakterystycznej szybciej powstają płytki grubsze a powyżej płytki cieńsze. Istotą modelu krystalizacji płytkowej było określenie zakresu stosowalności krystalizacji płytkowej.

Zaproponowany model krystalizacji oparty na rozważaniach termodynamiki przejścia *faza amorficzna* → *faza stała* opisujący zakres stosowalności krystalizacji stanowi ważne indywidualne osiągnięcie poznawcze Habilitantki. Jest ono wynikiem uprzednio prowadzonych badań zespołowych zarówno teoretycznych jak i eksperymentalnych w zakresie opracowania modelu przemiany polimorficznej izotaktycznego polipropylenu. Świadczy to o umiejętności łączenia pracy zespołowej z własną koncepcją badań.

Lektura autoreferatu nasuwa kilka uwag odnośnie sposobu przedstawienia problemu. Przede wszystkim brakuje ogólnego podsumowania. Habilitanta omawia każdą publikację oddzielnie, a mało jest powiązania tematycznego między nimi. Autoreferat kończy lakonicznym stwierdzeniem, że „*Obliczeń numerycznych dla modelu płytkowego porównane z danymi doświadczalnymi dały dobrą zgodność*”. Z jakimi danymi doświadczalnymi? Niektórych danym można doszukać się w publikacjach, ale lepiej

byłoby je szerzej zinterpretować. Weryfikacja modelu teoretycznego jest ważnym aspektem badań. Wnioski końcowe formułuje w sposób bardzo lakoniczny nadużywając słowa „Pokazano” (w 4 na 7 wniosków) i wskazując jedynie, że ..”można regulować” ..”można wpływać na kinetykę” (wnioski 4 i 5).

Do obliczeń użyła dane materiałowe izotaktycznego polipropylenu – ważnego technicznie polimeru masowo produkowanego i stosowanego. W nauce o polimerach zwłaszcza w dyscyplinie inżynieria materiałowa istotne jest powiązanie między strukturą a właściwościami fizykochemicznymi. Tego aspektu zabrakło w pracy dr B. Misztal-Faraj. Interesujące byłoby uzupełnienie rozważań teoretycznych modelu kinetycznego krystalizacji z właściwościami w skali makro. Habilitantka sygnalizuje jedynie we wstępie do autoreferatu, że struktura polimorficzna wpływa na różne właściwości: mechaniczne, elektryczne, biologiczne – jest to ogólnie wiadome. Ważne byłoby poznanie odpowiedzi na pytanie jak wpływa. Nadmieniam tylko, że dobór warunków krystalizacji prowadzi do uzyskania płytek o pożądanym wymiarach i zaplanowanych właściwościach – jakich właściwościach?

Modele kinetyczne są oparte na izotaktycznym polipropylenie, który ma fazę amorficzną i może mieć dwie fazy krystaliczne, stabilną α -iPP i metastabilną β -iPP. Wszystkie najistotniejsze wnioski końcowe – „oryginalne elementy cyklu publikacji” - Habilitantka formułuje tak jakby dotyczyły wszystkich polimerów. Nie zaznaczyła we wnioskach, że rozważane modele kinetyczne oparte były na danych materiałowych iPP. Nie wszystkie polimery krystalizują w formie α i β tak jak izotaktyczny polipropyleń. Mam wątpliwości czy wyniki badań upoważniają do tak daleko idącego uogólnienia bez odpowiedniego komentarza.

Przedstawione uwagi dyskusyjne nie podważają osiągnięć Habilitantki. Uzyskane przez nią wyniki modelowania procesu kinetycznego krystalizacji wnoszą wkład do pogłębienia wiedzy o przemianach wielofazowych i tworzenia się struktury lamelarniej w semikrystalicznym izotaktycznym polipropylenie.

Ocena dorobku naukowego

Przed uzyskaniem stopnia doktora nauk technicznych

Po ukończeniu studiów magisterskich w wyniku bardzo dobrym i uzyskaniu dyplomu magistra inżyniera podstawowych problemów techniki została doktorantką na dziennym studium doktoranckim na Wydziale Fizyki Teoretycznej i Matematyki Stosowanej PW.

Prowadzi badania nowych polielektrolitów żelowych na bazie poli(tlenku etylenu), PEO oraz elektrolitów polimerowych. Zajmuje się pomiarami właściwości elektrycznych wykonanych metodą spektroskopii impedencyjnej. Wyniki badań mających na celu poznanie zjawisk związanych z transportem jonów litu w polimerowych elektrolitach i żelach zostały opublikowane w 8 artykułach w tym w 5 z bazy JCR wspólnie z promotorem pracy doktorskiej prof. F. Krokiem oraz prof. Z. Florjańczykiem i innymi współautorami.

W czasie studiów doktoranckich prowadziła ćwiczenia rachunkowe i laboratoryjne z fizyki dla studentów Wydziału Mechatronik, Wydziału Inżynierii Materiałowej i Inżynierii Produkcji PW.

Po uzyskaniu stopnia doktora nauk technicznych

Po doktoracie zainteresowania naukowe dr B. Maształ-Faraj skupiały się na zagadnieniach badania krystalizacji polimerów metodą depolaryzacji światła. Uczestniczyła w badaniach prowadzonych przez prof. A. Ziabickiego, który opracował podstawy teoretyczne modelu krystalizacji oraz dostosowanie modelu kinetyki przemian wielofazowych do warunków eksperymentu metodą depolaryzacji światła. W pracach, których wyniki zostały wspólnie opublikowanych udział Habilitantki obejmował prace doświadczalne krystalizacji PE metodą depolaryzacji światła, analizę numeryczną oraz aktywny udział w dyskusji wyników. Istotą opublikowanych wyników badań było stwierdzenie, że natężenie światła depolaryzowanego przez układ dwójłomnych kryształów nie może być traktowane, jako miara stopnia krystaliczności. Natężenie światła jest nieliniową funkcją iloczynu stopnia krystaliczności i funkcji średniej grubości kryształów.

Badania doświadczalne przyczyniły się do modyfikacji układu pomiarowego i jego automatyzacji. W ramach współpracy z Akademią Nauk Ukrainy Habilitantka uczestniczyła w pracach koncepcyjnych i testowaniu układu pomiarowego do badania przejść fazowych metodą depolimeryzacji światła i programowaniu warunków czasowo-temperaturowych. Za pomocą tej aparatury zbadano krystalizację i temperaturę topnienia izotaktycznego polipropylenu. Habilitantka jest pierwszym autorem pracy opublikowanej w Polymer Testing w 2005 r.

Dalsze badania zagadnień krystaliczności polimerów doprowadziły dr B. Miształ-Faraj do interesującej koncepcji nowego modelu krystalizacji izotaktycznego polipropylenu, który zaowocował modelem teoretycznym stanowiącym istotny fragment rozprawy habilitacyjnej.(publikacja H4).

Dorobek naukowy po doktoracie obejmuje 5 publikacji współautorskich w czasopiśmie z bazy JCR, 1 publikacja autorska w materiałach konferencyjnych, 1 zgłoszenie patentowe oraz 6 prezentacji na konferencjach w tym 3 udziały bierne (nie podano autorów i tytułu wystąpienia). Była wykonawcą grantu badawczego KBN i głównym wykonawcą grantu badawczego MNiSW. Oba granty związane były tematycznie z kinetyką i mechanizmem polimorficznych przejść fazowych w polimerach i opracowaniem szybkiej metody badania krystaliczności polimerów.

Dorobek Habilitantki w ramach współpracy z zagranicą to: 2 tygodniowy pobyt we Włoszech, podczas którego zajmowała się badaniem krystalizacji biodegradowalnych polimerów oraz wspólne projekty z Instytutem Podstawowych Problemów Mechaniki NANU we Lwowie w ramach współpracy między PAN a Narodową Akademią Nauk Ukrainy.

Była wykonawcą 3 projektów z Akademią Nauk we Lwowie, 1 projektu była koordynatorem ze strony polskiej w latach 2006 – 2014. Tematyka tej współpracy była ściśle związana z zagadnieniami rozprawy habilitacyjnej a dotyczyła opracowania nowej metody badania struktury polimerów metodą depolaryzacji światła oraz rozbudowy układu pomiarowego.

Sumaryczny dorobek naukowy i podsumowanie

Dorobek naukowy obejmuje: 18 publikacji w tym 14 w czasopiśmie z bazy JCR, w tym 4 publikacje stanowiące rozprawę habilitacyjną, 1 zgłoszenie patentowe, 7 prezentacji – udziałów w konferencjach krajowych i zagranicznych, była wykonawcą/głównym wykonawcą w 2 grantach badawczych i w 3 projektach badawczych w ramach współpracy z zagranicą z IPPM NANU we Lwowie.

Liczba cytowań (bez autocytowań) wynosi 90, Index Hirscha 5, sumaryczny Impact Factor wynosi 30,978. Ilościowy dorobek nie jest imponujący, ale jego, jakość jest wysoka.

Wszystkie publikacje z wyjątkiem dwóch są współautorskie. Załączone są oświadczenia współautorów określające udział poszczególnych autorów w opracowaniu. We wszystkich publikacjach współautorskich z prof. A. Ziabicki, twórca modelu polimorficznej krystalizacji. Habilitanta omawia poszczególne publikacje z wyraźnym wskazaniem na udział prof. A. Ziabickiego oraz na udział własny. Lektura publikacji oraz autoreferatu prowadzi do wniosku, że udział merytoryczny Habilitantki był znaczący i nie budzi wątpliwości. Brała aktywny udział w modyfikacji modelu polimorficznego

i w sformułowaniu wniosków. Ma opanowany warsztat badawczy, zwłaszcza metodykę analityczną układu depolaryzacji światła w zastosowaniu do badania morfologii polimerów semikrystalicznych zwłaszcza poliolefin. Habilitantka sprawnie posługuje się obliczeniami numerycznymi za pomocą, których opisuje modele kinetyczne tworzenia się struktur krystalicznych. Wykazuje umiejętności koncepcyjne i inżynierskie w pracach nad modyfikacją układu pomiarowego. Zaproponowała własny model kinetyczny krystalizacji płytkowej izotaktycznego polipropylenu.

Modelowanie struktur krystalicznych w polimerach semikrystalicznych jest ważnym aspektem pogłębiającym aktualny stan wiedzy. Zrozumienie mechanizmu powstawania i zanikania różnych form faz krystalicznych ma duże znaczenie poznawcze oraz może mieć znaczenie także praktyczne. Habilitantka wykazuje umiejętność pracy w zespole. Świadczą o tym publikacje z autorami z rodzimego Instytutu oraz z Politechniki Warszawskiej i z Instytutu NANU we Lwowie. Ta owocna współpraca ukształtowała sylwetkę dr Beaty Misztal-Faraj, jako pracownika naukowego przygotowanego do samodzielnej pracy badawczej.

Wniosek końcowy

Uważam, że osiągnięcia naukowe przedstawione w cyklu jednotematycznych publikacji, jako podstawę do habilitacji oraz dorobek naukowy i organizacyjny odpowiadają wymogom określonych ustawą o stopniach naukowych i tytule naukowym z dnia 14 marca 2003 r. popieram wniosek o nadania dr inż. Beacie Misztal-Faraj stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk technicznych w dyscyplinie inżynieria materiałowa.



Wrocław, dnia 10 grudnia 2013 r.