

WNIOSEK O PRYZNANIE NAGRODY MINISTRA WŁAŚCIWEGO DO SPRAW SZKOLNICTWA WYŻSZEGO I NAUKI	
WNIOSKODAWCA	
<i>nazwa podmiotu</i>	POLITECHNIKA KRAKOWSKA
<i>imiona i nazwisko</i>	JAN KAZIOR
<i>pełniona funkcja</i>	REKTOR
<i>adres do korespondencji</i>	UL. WARSZAWSKA 24, 31-030 KRAKÓW
<i>numer telefonu</i>	1262802201
<i>adres poczty elektronicznej</i>	REKTOR@PK.EDU.PL
Wnioskuje o przyznanie ¹⁾	
nagrody: <input checked="" type="checkbox"/> indywidualnej <input type="checkbox"/> zespołowej za znaczące osiągnięcia w zakresie działalności: <input checked="" type="checkbox"/> naukowej <input type="checkbox"/> dydaktycznej <input type="checkbox"/> wdrożeniowej <input type="checkbox"/> organizacyjnej	<input type="checkbox"/> nagrody za całokształt dorobku
KANDYDAT DO NAGRODY ²⁾	
<i>imiona i nazwisko</i>	Maciej Gierada
<i>posiadany tytuł profesora, stopień naukowy albo stopień w zakresie sztuki lub tytuł zawodowy</i>	dr inż.
<i>dziedzina nauki albo dziedzina sztuki</i>	chemia
<i>dyscyplina naukowa albo dyscyplina artystyczna</i>	chemia
<i>określenie procentowego udziału w powstaniu osiągnięcia³⁾</i>	n/d
SZCZEGÓŁOWY OPIS ZNACZĄCYCH OSIĄGNIĘĆ KANDYDATA DO NAGRODY ^{4), 5)}	
<p>Katalizator Phillipsa ($\text{CrO}_x/\text{SiO}_2$) to jeden z najczęściej stosowanych w przemyśle układów katalitycznych umożliwiających otrzymanie polietylenu wysokiej gęstości (HDPE). Pomimo wielu lat intensywnych prac badawczych wiele kwestii związanych z jego naturą chemiczną nie zostało w pełni zrozumianych. Struktura form tlenkowych chromu na powierzchni utlenionego i zredukowanego katalizatora nie jest jednoznacznie zdefiniowana. Ponadto, nieznanym jest mechanizm redukcji oraz powstawania centrów aktywnych. Celem badań teoretycznych (DFT) składających się na spójny tematycznie cykl prac było poznanie tych mechanizmów oraz struktury form tlenkowych katalizatora $\text{CrO}_x/\text{SiO}_2$.</p> <p>W pierwszej części badań analizowano strukturę form tlenkowych chromu na powierzchni amorficznej krzemionki [2]. Otrzymane wyniki wskazują, że formy dimeryczne są mniej stabilne termodynamicznie w porównaniu do form monomerycznych, stąd te drugie powinny dominować na powierzchni badanego katalizatora. Redukcja niektórych formy monomerycznych może przebiegać z wytworzeniem formy Cr(IV), niemniej, w większości przypadków prowadzi do Cr(II). Cr(III) może natomiast powstawać na skutek hydrolizy wiązań</p>	

Cr-O-Si form powierzchniowych lub podczas hydratacji potencjalnych form dimerycznych.

W dalszym etapie prac badano mechanizm polimeryzacji etylenu w obecności układu $\text{CrO}_x/\text{SiO}_2$ [3,4]. Analizowano potencjalne mechanizmy generowania centrów aktywnych z udziałem form Cr(II) , Cr(III) oraz Cr(V) , w tym kilka nowych, niepostulowanych w literaturze. W przypadku form Cr(II) najniższe bariery aktywacji związane są z powstawaniem cyklicznych produktów przejściowych. Dla form Cr(III) wyznaczone bariery analogicznych przekształceń są wyższe. Mechanizm polimeryzacji zaproponowany w oparciu o formę Cr(III)-OH , do tej pory nie postulowaną w literaturze, charakteryzuje się najniższą całkowitą barierą aktywacji. W pierwszym etapie tego mechanizmu dochodzi do wytworzenia centrum aktywnego Cr(III)-CH=CH_2 . Analizowano również możliwą rolę rodnikowych defektów powierzchniowych w generowaniu centrów aktywnych oraz w przekształcaniu form monomerycznych Cr(II) do Cr(III) .

W ostatniej części badań analizowano różne potencjalne mechanizmy redukcji katalizatora $\text{CrO}_x/\text{SiO}_2$ etylenem [5]. Otrzymane wyniki wskazują, że najkorzystniejsza kinetycznie jest redukcja formy diokso Cr(VI) przebiegająca z wytworzeniem centrum Cr(II) oraz dwóch cząsteczek HCHO . Formaldehyd może następnie ulegać utlenieniu do CO_2 i H_2O . Mniej prawdopodobne jest jego przekształcenie do estru.

Badania kandydata [2-5] zostały opublikowane w renomowanych, branżowych czasopismach naukowych o zasięgu międzynarodowym:

- 1) **M. Gierada**, J. Handzlik, *Zastosowanie oraz struktura form powierzchniowych układów katalitycznych Cr/SiO_2* **Przem. Chem.** 94(6) (2015) 900-905, (IF = 0.399) <http://dx.doi.org/10.15199/62.2015.6.8>
- 2) **M. Gierada**, P. Michorczyk, F. Tielens, J. Handzlik, *Reduction of chromia-silica catalyst: A molecular picture* **J. Catal.** 340 (2016) 122-135, (IF = 7.354) <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcat.2016.04.022>
- 3) A. Chakrabarti, **M. Gierada**, J. Handzlik, I. E. Wachs, *Operando Molecular Spectroscopy During Ethylene Polymerization by Supported $\text{CrO}_x/\text{SiO}_2$ Catalysts: Active Sites, Reaction Intermediates, and Structure-Activity Relationship* **Top. Catal.** 59 (2016) 725-739, (IF = 2.355) <http://dx.doi.org/10.1007/s11244-016-0546-6>
- 4) **M. Gierada**, J. Handzlik, *Active sites formation and their transformations during ethylene polymerization by the Phillips $\text{CrO}_x/\text{SiO}_2$ catalyst*, **J. Catal.** 352 (2017) 314-328, (IF = 7.354) <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcat.2017.05.025>
- 5) **M. Gierada**, J. Handzlik, *Computational insights into reduction of the Phillips $\text{CrO}_x/\text{SiO}_2$ catalyst by ethylene and CO*, **J. Catal.** 359 (2018) 261-271 (IF = 6.844) <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2018.01.014>

Prace te były podstawą rozprawy doktorskiej kandydata, obronionej z wyróżnieniem 7 XI 2018 na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej. Były one również realizowane w ramach grantu NCN UMO-2015/19/N/ST4/00007, którego kierownikiem był kandydat.

Treść całej rozprawy doktorskiej, wraz z oświadczeniami współautorów o ich wkładzie w powstanie pracy, jednoznacznie wskazujących dominujący udział kandydata, jest dostępna pod: https://mgierada.github.io/dlc/phd_thesis_maciej_gierada.pdf

UZASADNIENIE ^{6),7)}

Osiągnięcie naukowe kandydata jest oryginalne i nowatorskie, gdyż m.in. zaproponował on, a następnie dogłębnie przeanalizował liczne, mechanizmy reakcji związane z polimeryzacją etylenu wobec katalizatora Phillipsa. Szacuje się, że katalizator ten odpowiada za około 50 % światowej produkcji polimeru, który ma tak istotne znaczenie dla nowoczesnego społeczeństwa. Badane przez kandydata zagadnienia pozostawały do tej pory nieustalone. Badania te mają duży wkład w rozwój badań nad katalizatorem Phillipsa oraz przyczyniają się istotnie do rozwoju katalizy heterogenicznej, chemii i fizykochemii powierzchni. Osiągnięcie to

ma również istotne znaczenie dla rozwoju gospodarki w skali międzynarodowej, kraju oraz regionu, gdyż badania kandydata mogą pomóc w projektowaniu nowych katalizatorów polimeryzacji etylenu, które będą wydajniejsze i bardziej przyjazne środowisku naturalnemu. Badania kandydata spotkały się już z pozytywnym oddźwiękiem w literaturze. W związku z tym, spełnione zostały kryteria określone w § 7 rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 23 stycznia 2019 r. w sprawie nagród ministra właściwego do spraw szkolnictwa wyższego i nauki.

DOKUMENTY SKŁADANE WRAZ Z WNIOSKIEM

- 1) Oświadczenie o niekaralności za umyślne przestępstwo lub umyślne przestępstwo skarbowe lub karą dyscyplinarną
- 2) Oświadczenie w sprawie zgody na przetwarzanie danych osobowych na potrzeby rozpatrzenia wniosku, przyznania oraz wypłacenia nagrody
- 3) List rekomendacyjny dr hab. Doroty Rutkowskiej-Żbik (IKiFP PAN)
- 4) List rekomendacyjny prof. dr hab. Artura Michalaka (WCh UJ)
- 5) Życiorys w języku angielskim ze szczególnym uwzględnieniem dorobku naukowego

Oświadczam, że:

- 1) informacje zawarte we wniosku są zgodne ze stanem faktycznym i prawnym;
- 2) wyrażam zgodę na przesyłanie korespondencji za pomocą środków komunikacji elektronicznej, o których mowa w ustawie z dnia 18 lipca 2002 r. o świadczeniu usług drogą elektroniczną (Dz. U. z 2019 r. poz. 123).

Miejscowość, data:

Objaśnienia:

- 1) Należy zaznaczyć właściwy kwadrat.
- 2) W przypadku wniosku o przyznanie nagrody zespołowej część „KANDYDAT DO NAGRODY” należy powtórzyć odpowiednio do liczby osób objętych wnioskiem i wypełnić indywidualnie dla każdej z tych osób.
- 3) Należy wypełnić wyłącznie w przypadku wniosku o przyznanie nagrody zespołowej.
- 4) Szczegółowy opis osiągnięć powinien uwzględniać odpowiednio do rodzaju nagrody w przypadku nagród za:
 - 1) znaczące osiągnięcia w zakresie działalności naukowej – informację o publikacjach naukowych kandydata do nagrody, a także informację o przebiegu badań naukowych, prac rozwojowych lub twórczości artystycznej, w wyniku których zostało uzyskane osiągnięcie objęte wnioskiem, albo w przypadku nagród za udział w pracach zespołu badawczego – informację o jego składzie, utworzeniu, celach oraz wskazanie zasięgu jego działania;
 - 2) znaczące osiągnięcia w zakresie działalności dydaktycznej – informację o działalności kandydata w zakresie kształcenia i wychowywania studentów, kształcenia doktorantów i promowania kadr dydaktycznych, o sposobie realizacji kształcenia specjalistycznego lub innych form kształcenia lub o opracowanych przez kandydata do nagrody podręcznikach akademickich;
 - 3) znaczące osiągnięcia w zakresie działalności wdrożeniowej – informację o:
 - a) sposobie wykorzystania wyników badań naukowych lub prac rozwojowych, wraz ze wskazaniem podmiotu, który je wykorzystał, lub
 - b) działaniach podjętych przez kandydata do nagrody, zmierzających do komercjalizacji wyników działalności naukowej oraz know-how związanego z tymi wynikami, lub o wynikach komercjalizacji przeprowadzonej przez kandydata;
 - 4) znaczące osiągnięcia w zakresie działalności organizacyjnej, określone w § 2 pkt 4 lit. a i b rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 23 stycznia 2019 r. w sprawie nagród ministra właściwego do spraw szkolnictwa wyższego i nauki (Dz. U. poz. 182) – informację o udziale kandydata do nagrody w inicjatywach wymienionych w tych przepisach oraz o uzyskanych w ich wyniku efektach;
 - 5) znaczące osiągnięcia w zakresie działalności organizacyjnej, określone w § 2 pkt 4 lit. c rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 23 stycznia 2019 r. w sprawie nagród ministra właściwego do spraw szkolnictwa wyższego i nauki – informację

o osiągnięciach zarządczych lub organizacyjnych, w szczególności w zakresie gospodarowania majątkiem, polityki kadrowej, poprawy wyniku finansowego lub wyniku ewaluacji jakości działalności naukowej podmiotu, lub wprowadzenie nowych, innowacyjnych procedur zarządczych, a także informację o uzyskaniu zatwierdzenia sprawozdania finansowego za rok, w którym zostało uzyskane dane osiągnięcie;

- 6) całokształt dorobku – opis przebiegu kariery zawodowej i naukowej kandydata do nagrody, w tym informację o publikacjach naukowych kandydata do nagrody.
- 5) Opis znaczących osiągnięć nie powinien przekroczyć 5000 znaków. W przypadku gdy szczegółowy opis znaczących osiągnięć kandydata do nagrody przekracza dopuszczalną liczbę znaków, należy go sporządzić w formie odrębnego dokumentu i przedłożyć wraz z wnioskiem.
- 6) Należy w szczególności wykazać spełnienie kryteriów określonych w § 7 rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 23 stycznia 2019 r. w sprawie nagród ministra właściwego do spraw szkolnictwa wyższego i nauki.
- 7) W przypadku wniosku o przyznanie nagrody zespołowej należy odnieść się do osiągnięcia uzyskanego przez grupę osób objętych wnioskiem o przyznanie nagrody.