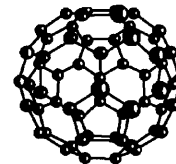


UNIwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego W WARSZAWIE



WYDZIAŁ MATEMATYCZNO-PRZYRODNICZY SZKOŁA NAUK ŚCISŁYCH

Auditorium Maximum, p. 113, ul. Wóycickiego 1/3, 01-938 Warszawa, tel./faks: (48 22) 569 96-70

Prof. dr hab. inż. Zbigniew Karpiński, prof. zwyczajny
Instytut Chemii

Centrum Laboratoryjne Nauk Przyrodniczych
Laboratorium 109, tel. kom. 604 053 267
ul. Wóycickiego 1/3, 01-938 Warszawa
e-mail: z.karpinski@uksw.edu.pl

Warszawa, 9 listopada, 2017

RECENZJA

rozprawy habilitacyjnej pt.

„*Termodynamika i kinetyka procesów*

w układzie nanokrystaliczne żelazo-amoniak-wodór”

oraz OCENA

dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego

dr. inż. Rafała Pelki

ubiegającego się o uzyskanie stopnia naukowego doktora habilitowanego

Ogólna charakterystyka sylwetki naukowej Habilitanta

Dr inż. Rafał Pelka (rocznik 1977) uzyskał tytuł magistra inżyniera na Politechnice Śląskiej w Gliwicach w 2003 roku, po 5-letnich studiach wyższych na Wydziale Chemicznym i po przedstawieniu pracy magisterskiej pt. „*Analiza dynamiki kaskady reaktorów rurowych z dzielonym recyklem*” wykonanej pod kierunkiem dr. inż. Henryka Merty. Wyniki pracy magisterskiej zostały wykorzystane w czterech publikacjach w uznanych czasopismach z listy filadelfijskiej. Po zakończeniu studiów i krótkim zatrudnieniu w firmie Sozoprojekt Sp. z o.o. na stanowisku asystenta projektanta, w 2005 roku Habilitant podjął studia doktoranckie na Zachodniopomorskim Uniwersytecie Technologicznym w Szczecinie, na Wydz. Technologii i Inżynierii Chemicznej, które ukończył w 2009 roku, broniąc pracę doktorską pt. „*Badania kinetyki procesu otrzymywania nanokrystalicznych związków żelaza Fe_xO , Fe_xN* ”. Promotorem tej kilka razy wyróżnionej rozprawy był prof. dr hab. inż. Walerian Arabczyk. Po uzyskaniu doktoratu, Habilitant nie odbył dłuższego stażu podoktorskiego o charakterze badawczym, natomiast wziął udział w szkoleniowo-stażowym programie TOP500 Innovators (30.04-29.06.2012, Stanford University), organizowanym przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

Od roku 2010 dr inż. Rafał Pelka jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w Instytucie Technologii Chemicznej Nieorganicznej i Inżynierii Środowiska, Wydziału Technologii i Inżynierii Chemicznej ZUT.

Dr inż. Rafał Pelka jest autorem 33 publikacji w czasopismach z listy filadelfijskiej, z czego 19 przypada na okres po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. Sumaryczny impact factor (IF) wyniósł ponad 64 punkty, co przekłada się na wysoką średnią wartość IF ok. 2 na jedną publikację. W klasyfikacji rankingu MNiSW Habilitant uzyskał 815 punktów. Cytowalność prac dr. inż. Rafała Pelki (219, bez autocytowań 140) dowodzi, że jego prace są czytane przez środowisko naukowe. Podobnie wrażenie wynika z solidnej wartości indeksu Hirscha równego 10. Czasopisma, w których dr Pelka publikował swoje prace należą do czołowych dla nauki z zakresu chemii, w tym szczególnie chemii fizycznej nanomateriałów (*Journal of Physical Chemical A i C, Physical Chemistry Chemical Physics, Journal of Nanomaterials*) i katalizy (*Catalysis Today, Catalysis Letters, Topics in Catalysis*) cechujące się wysoką wartością współczynnika wpływu i punktacji przyznanej przez MNiSW. Aktywność konferencyjna Habilitanta, szczególnie w okresie podoktorskim, dotyczy jego udziału w konferencjach w Polsce i na Słowacji, z których część należy uznać jako prestiżowe. Rezultaty prowadzonych przez dr Pelkę badań były prezentowane w formie 26 prac na konferencjach krajowych i 36 na konferencjach zagranicznych. Jest on współautorem 19 artykułów pełnotekstowych w materiałach konferencyjnych.

Dr inż. Rafał Pelka jest współtwórcą pięciu patentów oraz czterech zgłoszeń patentowych. Współpracował przy opracowaniu projektów technologicznych i dokumentacji projektowych z zakresu ochrony środowiska, dotyczących np. instalacji do separacji i suszenia bieli tytanowej dla Grupy Azoty ZCh Police.

Podsumowując tę część charakterystyki Habilitanta stwierdzam, że Jego ogólny dorobek naukowy jest solidny i nie budzi moich wątpliwości.

Ocena osiągnięcia naukowego na podstawie przedstawionego cyklu publikacji

Recenzowaną rozprawę habilitacyjną zatytułowaną „*Termodynamika i kinetyka procesów w układzie nanokrystaliczne żelazo-amoniak-wodór*” stanowi trzynaście artykułów naukowych, ponumerowanych od H1 do H13, opublikowanych w czasopismach z listy filadelfijskiej. Sumaryczny impact factor publikacji wchodzących w osiągnięcie naukowe wynosi 33,969 (lub 33,298, biorąc pod uwagę IF z roku publikacji), dając średnią wartość na jedną publikację ok. 2,6. Poza pozycją H12, pozostałe prace wchodzące w skład rozprawy

habilitacyjnej opublikowano z udziałem Prof. Waleriana Arabczyka i innych osób. Z poszczególnych wartości wkładu własnego podanego przez Habilitanta można wywnioskować, że średni jego wkład w powstanie jednej publikacji wyniósł prawie 70 %, co wskazuje na dominujący jego udział w przygotowaniu złożonego cyklu prac. Z oświadczeń złożonych przez współautorów trudno zweryfikować taki stan rzeczy, zwłaszcza, że w części prac Habilitant nie pełnił roli autora korespondencyjnego, a w większości prac prof. Walerian Arabczyk był autorem koncepcji i metodyki badań. Trzeba jednak zauważyć niemal chronologiczny wzrost udziału Habilitanta, co świadczy o rosnącym w czasie stopniu jego usamodzielnienia. Publikacjom towarzyszy obszerne omówienie w autoreferacie (w Załączniku nr 2), pełniące rolę przewodnika po nich.

Przedłożone do oceny osiągnięcie naukowe stanowi, zgodnie z ustawą, cykl publikacji powiązanych tematycznie. Mając doświadczenie własne i ośrodka w zakresie katalizatorów żelazowych do syntezy/rozkładu amoniaku, Habilitant postawił sobie ambitne zadanie dostarczenia nowych i weryfikacji wcześniej rezultatów naukowych uzyskanych w grupie prof. Arabczyka, związanych ze strukturą nanomateriałów opartych na żelazie. Spoiwem tematycznym rozprawy habilitacyjnej, zgodnie z jej tytułem, jest reakcja azotowania nanomateriałów na bazie żelaza, realizowana w kontrolowanej atmosferze gazowej amoniakowódór, której skład decydował o tzw. potencjale azotującym. Reakcja prowadzona w różnorodnych warunkach reakcji rozkładu amoniaku, prowadząca do zmian w strukturze i składzie powierzchni i wnętrza fazy katalizatora żelazowego, była starannie poddana obróbce kinetycznej oraz rygorystycznej analizie termodynamicznej. Oba wspomniane aspekty, tj. kinetyka i termodynamika reakcji azotowania, były analizowane w różnym stopniu w poszczególnych publikacjach, chociaż z naturalnych względów przenikają się we wszystkich pracach. Szczególną jednak uwagę skupiono na aspekcie termodynamicznym, weryfikując szereg wcześniej założonych hipotez oraz uzyskanych wyników w grupie badawczej Prof. Waleriana Arabczyka. Habilitant postawił sobie za cel zweryfikowanie hipotezy, że struktura nanomateriałów jest efektem ustalenia się stanu równowagi termodynamicznej pomiędzy powierzchnią i objętością nanokrystalitów a składnikami rozlokowanymi w przestrzeniach pomiędzy nanokrystalitami. Wybrane w tym celu przez Habilitanta eksperymentalne metody badawcze łączyły w sobie możliwości analizowania składu fazowego katalizatora oraz składu fazy gazowej w reaktorze. Bardzo skutecznie posłużyły tu zastosowana *in situ* metoda grawimetryczna sprzężona z katarometrycznym monitorowaniem składu fazy gazowej. Badaniom tym towarzyszyły szeroko zakrojone pomiary charakterystyczne *ex-situ*, takie jak dyfraktometria rentgenowska czy metoda BET dostarczające informacji dotyczących

fizykochemicznej charakterystyki badanych układów. Okazjonalnie zastosowano mikroskopię elektronową.

Trudno jest w zwartej recenzji odnieść się do oceny każdej z 13 publikacji składających się na osiągnięcie naukowe. Dlatego chciałbym zbiorczo skoncentrować się na najciekawszych, moim zdaniem, wynikach Habilitanta. Do najważniejszych osiągnięć zaliczyłbym:

- a) Skorelowanie szybkości rozkładu NH_3 na nanokrystalicznym żelazie i azotku żelaza od wspomnianego wcześniej potencjału azotującego. Ciekawym odkryciem okazało się stwierdzenie, że na żelazie szybkość rozkładu amoniaku rośnie z tym potencjałem, podczas gdy na azotku żelaza γ' (Fe_4N) uzyskano korelację odwrotną (prace H1 i H2).
- b) Zaproponowanie mechanizmu, który dobrze opisuje proces azotowania nanokrystalicznego żelaza amoniakiem. To umożliwiło określenie takich parametrów jak zawartość azotu w fazie stałej, entalpia segregacji i stopień pokrycia powierzchni żelaza azotem (praca H2).
- c) Opracowanie bilansu energetycznego układu nanokrystaliczne żelazo-amoniak-wodór. Pozwoliło to wyjaśnić na wyjaśnienie sekwencji zachodzenia przemiany fazowej do azotku żelaza w trakcie azotowania. Zależność funkcji ΔG (sprowadzona do zależności entalpowej) przemiany fazowej od stosunku powierzchnia/objętość nanocząstek prowadzi do wniosku, że ze wzrostem stopnia przereagowania (i potencjału azotującego) najpierw duże kryształy α -żelaza ulegają przemianie fazowej do azotku żelaza γ' (Fe_4N), a następnie stopniowo coraz mniejsze (praca H10).
- d) Stwierdzenie zjawiska histerezy dla zależności stopień zaazotowania – potencjał azotujący. Wyjaśnienie tego zjawiska w oparciu o argumenty termodynamiczne, w których dla układu nanokrystaliczne żelazo-amoniak-wodór parametr związany z rozmiarem nanokryształu uwzględnic jako dodatkowy stopień swobody. Wówczas, zgodnie z „rozszerzoną” regułą faz Gibbsa możliwe jest współistnienie w stanach równowagi obok siebie dwóch faz krystalograficznych, $\alpha\text{-Fe} + \gamma' \text{Fe}_4\text{N}$ (praca H11). Można byłoby tu jedynie zapytać o ewentualny wpływ stopnia zdefektowania nanocząstek (związanego z ich wielkością) na wielkość pętli histerezy.
- e) Osiągnięcia metodyczne Habilitanta. Opracowanie chemicznej metody określania rozkładu wielkości nanokryształów opartej na pomiarze stopnia przereagowania substancji nanokrystalicznej odpowiadającego określonemu potencjałowi chemicznemu fazy gazowej. Pomyślne zastosowanie tej metody dla określenia względnego i bezwzględnego rozkładu wielkości nanokryształów żelaza w

przemysłowym katalizatorze syntezy amoniaku. Stwierdzenie, że za pomocą nowej metody można uzyskać wyniki o większej rozdzielczości w porównaniu z konwencjonalną metodą rentgenograficzną (praca H12). Szkoda, że nie można było tej nowej metody zweryfikować za pomocą użycia wysokorozdzielczej transmisyjnej mikroskopii elektronowej. Z drugiej strony należy nadmienić, że chemiczna sonda zaproponowana przez Habilitanta jest metodą *in-situ* (stosowana w wysokotemperaturowej atmosferze $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{-N}_2$), co ma znaczenie dla analizy katalizatora do syntezy amoniaku.

Momentem szczytowym habilitacji jest, w moim przekonaniu, opracowanie metody pn. „Chemicznym Potencjałem Programowana Reakcja” (ang. Chemical Potential Programmed Reaction – CPPR) do określania właściwości fizykochemicznych nanomateriałów będących w stanie bliskim równowagi chemicznej z otaczającą je atmosferą gazową. Przy zastosowaniu tej metody możliwe jest przeprowadzenie procesów (które mogą być sterowane potencjałem chemicznym fazy gazowej) w kontrolowany, ściśle określony sposób, zmieniając potencjał chemiczny gazu. Mierząc określoną wielkość fizyczną lub chemiczną nanomateriału w stanie bliskim równowagi chemicznej i znając rozkład wielkości nanokrystalitów można określić właściwość fizyczną lub chemiczną krystalitu o określonej wielkości (praca H13).

Uważam, że przedstawione w osiągnięciu naukowym wyniki i ich interpretacja znacząco pogłębiają naszą wiedzę w zakresie nauki o nanomateriałach, szczególnie tych, które zawierają żelazo. Dodatkowym atutem tego osiągnięcia naukowego jest jego ukierunkowanie na problemy stosowane, ważne dla technologii chemicznej w zakresie przygotowania, aktywacji i charakteryzacji katalizatorów do syntezy amoniaku.

Merytoryczna strona rozprawy habilitacyjnej jest na wysokim poziomie, a pomyślnie stosowanie różnych technik pracy oraz metod teoretycznych i eksperymentalnych w zakresie kinetyki reakcji i termodynamiki chemicznej świadczy o bardzo dobrym przygotowaniu dr inż. Rafała Pelki do podejmowania różnego typu wyzwań badawczych. Dlatego pozwalam sobie na poniższe sformułowanie wniosku.

Podsumowując uważam, że przedstawiony jako osiągnięcie naukowe cykl publikacji, że pod względem merytorycznym stanowi wystarczający, w rozumieniu art. 16-tego Ustawy, wkład dr. inż. Rafała Pelki w rozwój nauki o materiałach, wymagany do przyznania stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Ocena dorobku dydaktycznego, w zakresie popularyzacji nauki, dorobku organizacyjnego i współpracy naukowej

Jako pracownik naukowy uczelni wyższej, dr inż. Rafał Pelka z obowiązku prowadzi wykłady, ćwiczenia audytoryjne, laboratoryjne i projektowe dla studentów kilku kierunków studiów I i II stopnia. Dotyczą one nauczania w zakresie chemii, technologii chemicznej (w tym nanotechnologii) oraz inżynierii chemicznej. Przekazuje również wiedzę w zakresie marketingu i zarządzania oraz podstaw informatyki i automatyki. Przedstawiony w dokumentach wachlarz obowiązków dydaktycznych Habilitanta należy uznać za bardzo szeroki pod względem merytorycznym, co niewątpliwie dobrze świadczy o jego dużej wiedzy o szerokich zainteresowaniach naukowych. Jest również aktywny w zakresie prowadzenia zajęć w języku angielskim, w ramach programu Erasmus. Był promotorem sześciu prac inżynierskich i magisterskich oraz promotorem pomocniczym dla trzech doktorantów.

W ocenie dorobku w zakresie popularyzacji nauki należy odnotować wykład, który w roku 2009 Habilitant wygłosił w ramach LLP Erasmus Programme 2009, pt. *Modelling of the kinetics of the reaction in the gas-solid system*. Ponadto w ofercie zajęć dla młodzieży ponadgimnazjalnej współprowadził zajęcia laboratoryjne pt. *Czy katalizator samochodowy różni się od katalizatora syntezy amoniaku?*

Powierzenie dr. inż. Rafałowi Pelce wykonania recenzji kilkunastu artykułów przez poważne czasopisma naukowe świadczy o renomie, którą zdobył w początkowej fazie swojej kariery naukowej. Był też ekspertem w projekcie Foresight Regionalny Województwa Zachodniopomorskiego w ramach projektu *Tworzenie, rozwój i aktualizacja Regionalnej Strategii Innowacyjności Województwa Zachodniopomorskiego*, realizowanego na podstawie umowy nr 1/RP/2010 z firmą IBC Group Central Europe Holding SA.

Habilitant regularnie otrzymywał nagrody za osiągnięcia naukowe od Rektora ZUT.

Dr inż. Rafał Pelka współpracuje krajowymi zakładami przemysłu chemicznego (Seco/Warwick Europe Sp. z o.o., Grupa Azoty S.A. Zakłady Chemiczne Police). W ramach kooperacji międzynarodowej Habilitant współdziała z Wydziałem Fizyki Ciała Stałego Uniwersytetu w Atenach (prof. dr hab. Niko Guskos). Jest członkiem kilku towarzystw naukowych, w tym American Chemical Society.

W podsumowaniu uważam, że dorobek dydaktyczny i organizacyjny Habilitanta oraz dotychczas wykazana przez Niego współpraca naukowa z innymi ośrodkami wypełniają wymogi Ustawy.

Finalne podsumowanie oceny

Biorąc pod uwagę wszystkie kryteria, wyrażone wcześniej oceny częściowe stwierdzam, że wniosek dr. Rafała Pelki spełnia kryteria określone art. 16 „Ustawy o stopniach i tytułach naukowych” (Dz. U. z 2016 r. poz. 882, ze zm. W dz. U. z 2016 r. poz.1311).



Zbigniew Karpiński