



## OCENA

### osiągnięcia naukowego

pt. „Nowe rozwiązania inżynieryjno-procesowe w technologiach syntezy organicznej”

dr. inż. Arkadiusza Chruściela

### Informacja ogólna

Niniejsza recenzja została wykonana w zgodzie z decyzją Rady Doskonałości Naukowej z dnia 14 października 2023 r. (DRKN.Z2.400.151.2023) oraz uchwałą nr 39/2023 Rady Dyscypliny Inżynieria Chemiczna Politechniki Śląskiej z dnia 8 listopada 2023 r., przekazanych przez Przewodniczącego Rady Dyscypliny Prof. dr. hab. inż. Wojciecha Simkę pismem z dnia 11 listopada 2023 r.

Opinia dotyczy dokumentacji załączonej do wniosku z dnia 6.08.2023 r., złożonego przez dr. inż. Arkadiusza Chruściela o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria chemiczna.

### Sylwetka Habilitanta - przebieg pracy naukowej i dydaktycznej

Dr inż. Arkadiusz Chruściel ukończył w roku 1989 studia na Wydziale Technologii i Inżynierii Chemicznej Politechniki Śląskiej uzyskując tytuł zawodowy magistra inżyniera na podstawie obronionej pracy magisterskiej pt. „Spektrofotometryczne oznaczanie boru za pomocą Azometyny H i Rezorcyolu H”.

Po ukończeniu studiów Habilitant rozpoczął pracę na Wydziale Chemicznym Politechniki Śląskiej jako asystent, a następnie w latach 1993-1995 kontynuował zatrudnienie w Instytucie Ciężkiej Syntezy Organicznej w Kędzierzynie-Koźlu jako adiunkt. W roku 1994, na Wydziale Technologii i Inżynierii Chemicznej Politechniki Poznańskiej, uzyskał stopień doktora nauk chemicznych. Tematem pracy doktorskiej były: „Badania nad opracowaniem analityki składu polioksaalkilowych estrów kwasu borowego” (promotor: prof. dr hab. inż. Jan Szymanowski). Za rozprawę tę uzyskał wyróżnienie.

W latach 1995-1996 dr inż. A. Chruściel, jako zastępca Kierownika Ośrodka Badawczego ds. Naukowych, pracował w Zakładach Elektrod Węglowych ZEW (obecnie

TOKAI-KOBEX) w Raciborzu. Habilitant nie podaje informacji o swym zatrudnieniu w latach 1996-2003. Natomiast w roku 2003 podjął pracę w firmie MEXEO Wiesław Hreczuch w Kędzierzynie-Koźlu, w której pracuje do dzisiaj. W okresie zatrudnienia w tej firmie pracował na stanowisku Specjalisty ds. Badań i Rozwoju (2003-2014), a od roku 2014 do dzisiaj na stanowisku Dyrektora ds. Badań i Rozwoju. Jednak, ten ostatni okres zatrudnienia jest opisany chyba niezbyt precyzyjnie, bo w *Wykazie osiągnięć* znaleźć można stwierdzenie, że jedno z osiągnięć Habilitanta zostało zrealizowane i wdrożone podczas zatrudnienia w zakładzie Henkel KGaA w Raciborzu, w którym w latach 2012-2014 (a więc podczas deklarowanego powyżej zatrudnienia w MEXEO ?) pełnił on funkcję Szefa Produkcji na Wydziale Sulfonatów.

Uwzględniając przedstawiony w *Autoreferacie* dorobek naukowy Habilitanta uzyskany w tym okresie, należy z uznaniem podkreślić, że jego działalność jako pracownika prywatnej firmy związana była z prowadzeniem w szerokim zakresie badań naukowych oraz z dużą aktywnością publikacyjną. Zasluguje to na szczególnie uznanie, bo przy takich uwarunkowaniach nie jest to ani regułą, ani często spotykanym przypadkiem.

Podobnie, na uznanie zasługuje prezentowany dorobek dydaktyczny dr. inż. Arkadiusza Chruściela, na który składają się:

- autorstwo rozdziałów w 3 podręcznikach akademickich (w okresie bezpośrednio przed i po uzyskaniu stopnia doktora),
- pełnienie funkcji opiekuna 3 prac magisterskich na Politechnice Śląskiej, Uniwersytecie Opolskim i Uniwersytecie Technicznym w Wiedniu,
- pełnienie funkcji promotora pomocniczego 2 prac doktorskich wykonywanych na Uniwersytecie Opolskim i Politechnice Śląskiej

Na szczególne podkreślenie zasługuje aktywność Habilitanta jako wykładowcy. Może on pochwalić się imponującym, jak na osobę nie pracującą na uczelni, dorobkiem wykładowym dla studentów i doktorantów. W okresie od 2014 do 2023 roku, na dorobek ten składa się 10 wykładów (w tym 6 w języku angielskim), wygłoszonych na Politechnice Śląskiej i Poznańskiej oraz w ośrodkach partnerów z projektu ERA-IB: Ruhr-Universität Bochum (RUB), Technische Universiteit Delft oraz Technische Universität Bergakademie Freiberg.

### **Ocena osiągnięcia naukowego**

Osiągnięcia naukowe dr. inż. Arkadiusza Chruściela wskazane we wniosku oraz przedstawione szczegółowo w *Autoreferacie* i w *Wykazie osiągnięć* nosi tytuł: „Nowe

rozwiązania inżynieryjno-procesowe w technologiach syntezy organicznej”. Stanowi ono cykl 18 publikacji o międzynarodowym zasięgu, z których 16 pojawiło się w czasopismach naukowych, natomiast dwa [H17-H18] zostały opublikowane jako rozdziały w monografiach (nie ma informacji, czy były to recenzowane wydawnictwa). Spośród wspomnianych 16 artykułów naukowych, 15 zostało opublikowanych w czasopismach znajdujących się w wykazie ministerialnym. Artykuły te zostały opublikowane w dość długim okresie – od roku 2009 do 2023, co związane jest bezpośrednio ze specyfiką badań prowadzonych przez dr. inż. Chruściela – wszystkie one dotyczyły badań i wdrożeń procesów przemysłowych.

Biorąc pod uwagę profile i renomę poszczególnych wydawnictw, w których Habilitant umieścił swoje publikacje, należy stwierdzić, że 3 spośród nich - *Ind. Eng. Chem. Res.*, *Chem. Eng. Res. Des.* oraz *Chem. Eng. Process.* [H2, H13 oraz H16] należą do grupy czasopism najbardziej prestiżowych dla dyscypliny *Inżynieria Chemiczna*. Do grupy czasopism silnie związanych z tematyką inżynierii chemicznej zaliczyć można również czasopismo *Termochimica Acta* [H12]. Grupa ok. 6 publikacji [H4, H6-H10] umieszczona została w czasopismach o profilach związanych z chemią, fizyką czy chemią stosowaną. Artykuły [H1, H3, H11, H14, H15] opublikowane w czasopismach *Przemysł Chemiczny* i *Polimery* - ze względu na to, że zostały opublikowane w języku polskim – mają zapewne mniejszy zakres oddziaływania, jednak czasopisma te cieszą się dużą renomą w krajowym środowisku naukowym związanym z przemysłem chemicznym i podobnymi.

Należy stwierdzić, że wszystkie publikacje przedstawione jako osiągnięcie naukowe są pracami z wieloma autorami – przeważnie mające 3-5 autorów, jedynie 3 prace [H3, H10, H13] mają dwóch autorów. Sytuacja taka stanowiłaby, pomimo załączonych oświadczeń współautorów oraz specyfiki prac badawczo-wdrożeniowych, trudność dla recenzenta w ocenie rzeczywistego wkładu Habilitanta w prezentowane osiągnięcie naukowe. Jednak, dr inż. Arkadiusz Chruściel – zarówno w *Autoreferacie* jak i w *Wykazie osiągnięć* – zamieścił bardzo szczegółowy opis swego osiągnięcia, dzięki czemu ocena jego rzeczywistego merytorycznego udziału w tych pracach jest w pełni możliwa. Z tego powodu decyzję Habilitanta o tak szczegółowej prezentacji swego osiągnięcia oceniam bardzo dobrze.

Istotą całości dorobku habilitacyjnego dr. inż. Chruściela są prace, które zostały scharakteryzowane jako odrębne (składowe) osiągnięcia:

#1 - opracowania i wdrożenia technologii wytwarzania katalizatorów typu DMC dla dimetylocyjanowych reakcji otwarcia pierścienia oksiranowego,

#2 - opracowania i wdrożenia metody prowadzenia etapu dojrzewania mieszaniny reakcyjnej przemysłowego procesu sulfonowania alkilobenzenu,

#3 - opracowanie modelu węzła syntezy Bisfenolu A oraz implementacja tego modelu do optymalizacji i projektowania, nowego energooszczędnego procesu wytwarzania tej substancji.

Prace te zostały bardzo dokładnie opisane w *Autoreferacie*. W każdym z opisów zostały scharakteryzowane przedmiot i zakres osiągnięcia, sporo uwagi zostało poświęcone podłożu formalno-organizacyjnemu oraz finansowemu osiągnięcia, ale najważniejszym elementem był zawsze bardzo szczegółowy opis merytoryczny.

W osiągnięciu #1 naukowy udział Habilitanta związany był z opracowaniem oryginalnej technologii wytwarzania katalizatora DMC (w trzech wariantach technologicznych), przeprowadzeniem badań jego właściwości katalitycznych oraz właściwości uzyskanych z udziałem tych katalizatorów produktów reakcji polimeryzacji oraz opracowanie projektu bazowego i wykonawczego przemysłowej instalacji wytwarzania katalizatora.

W wyniku przeprowadzonych prac badawczych Habilitant wykazał, że dedykowany dla reakcji oksyalkilenowania bardzo aktywny katalizator DMC może być otrzymany z prostych, ogólnodostępnych i tanich substratów, poprzez przeprowadzenie bezpośredniej syntezy w roztworze wodnym, z wykorzystaniem flokulanta z grupy polielektrolitów. Flokulant ten umożliwia aglomerację bezpostaciowego osadu, co ułatwia oddzielenie fazy ciągłej od flokuł. Opracowana metoda jest przedmiotem patentu. W dalszej części działań przeprowadzone zostały prace badawcze prowadzące do wdrożenia technologii i komercjalizacji produktu (katalizatory DMC) oraz technologii ich wytwarzania w skali przemysłowej.

Z naukowego punktu widzenia działania te doprowadziły do określenia roli liganda w procesie syntezy katalizatora DMC oraz wpływu stężenia tego katalizatora na masę cząsteczkową i rozkład wielkości mas cząsteczkowych produktu polimeryzacji (oksypropylenowania), rozszerzenia zastosowania katalizatora DMC również w procesie polimeryzacji tlenu etylenu, opracowania metody charakteryzowania katalizatorów DMC z wykorzystaniem analizy termicznej, metody spektroskopii promieniowania synchrotronowego i analizy EXAFS/XANES oraz metody XPS. Badania Habilitanta w tym zakresie dostarczył również istotnej wiedzy dotyczącej struktury katalizatora DMC – tzn. nie stwierdzono obecności atomów liganda w sferze koordynacyjnej atomów cynku.

Uzyskane wyniki tych badań zostały opublikowane w serii publikacji [H1-H12]. To opracowanie - zarówno ze względu na tematykę podjętych badań, szeroki obszar w jakim je prowadzono oraz uzyskane wyniki - stanowi znaczący wkład w kompendium wiedzy dotyczącej katalizatorów typu DMC. Dodatkowo, badania te miały aspekt nie tylko naukowy ale również użytkowy, bo ich wyniki zostały wykorzystane do uruchomienia procesu produkcji katalizatora DMC w skali przemysłowej.

W osiągnięciu #2 naukowy udział Habilitanta związany był z opracowaniem koncepcji ulepszonych procesu "dojrzewania" mieszaniny reakcyjnej procesu sulfonowania, opracowanie modelu matematycznego tego procesu, weryfikacja koncepcji procesu oraz jego modelu z wykorzystaniem danych uzyskanych z zaprojektowanej przez Habilitanta instalacji eksperymentalnej. Praktycznym zwieńczeniem przeprowadzonych badań było uruchomienie zmodernizowanego węzła instalacji przemysłowej.

Na przeprowadzone prace badawcze składały się: opracowanie równania kinetycznego procesu dojrzewania kwasu alkilobenzenosulfonowego (LABSA) oraz opracowanie modelu matematycznego reaktora dojrzewania. Wyniki przeprowadzonych badań przedstawiono w publikacji naukowej [H13] oraz były one podstawą opracowania patentowego. Na ich podstawie opracowano koncepcję ulepszonych sposobu etapu dojrzewania procesu wytwarzania kwasu alkilobenzenosulfonowego. Opracowany model matematyczny, po pozytywnej weryfikacji przeprowadzonej z udziałem badań własnych przeprowadzonych w instalacji pilotażowej, posłużył do symulacji procesu przemysłowego i umożliwił modyfikację istniejącej instalacji przemysłowej.

Model matematyczny procesu reaktora dojrzewania zaprezentowano dla przypadku procesu periodycznego biegnącego w warunkach nieustalonych oraz przypadku procesu ciągłego w warunkach stacjonarnych. Uwzględniono również przebieg procesu quasi-periodycznego (półciągłego) prowadzonego w warunkach nieustalonych, w którym reakcja przebiega już podczas napełniania zbiornika reaktora. Szczególnie wartościowe w przeprowadzonej analizie jest sformułowanie i przedyskutowanie równań modelowych, metod rozwiązania tych równań oraz uzyskanych wyników. Jednak dla pełnej klarowności wyводу zabrakło mi w opisie Habilitanta nazw pakietów oprogramowania jakiego używał do rozwiązywania opracowanych równań modelowych. Przy tej okazji chciałem podzielić się uwagą, że pierwszy raz spotkałem się z pisownią „La Place” stosowaną w przypadku, gdy ma się na myśli słynnego matematyka Pierra Simona de Laplace.

W osiągnięciu #3 naukowy udział Habilitanta związany był z opracowaniem modelu matematycznego strefowego reaktora syntezy Bisfenolu A (reaktor Kiedika-Kołta), weryfikacją tego modelu w skali przemysłowej, zastosowaniem opracowanego modelu do modernizacji węzła syntezy istniejącej przemysłowej instalacji BPA oraz opracowaniem nowej technologii wytwarzania Bisfenolu A i obliczeniach projektowych prowadzonych w ramach etapu komercjalizacji tej technologii. Wyniki tych badań zostały opublikowane w cyklu artykułów [H14]-[H16], w rozdziałach dwu monografii [H17-H18] oraz posłużyły do opracowania patentu. Oprócz artykułu [H16], na szczególne wyróżnienie zasługuje tu monografia [H18], zarówno ze względu na renomę wydawcy i edytora, jak i tematykę całego opracowania oraz na pokaźną objętość pracy zamieszczonej przez zespół Habilitanta.

Doceniając ambitną próbę Habilitanta związaną z modelowaniem reaktora, mam jednak zastrzeżenia związane z nieprecyzyjnym opisem wyprowadzania opracowanego modelu. Zaproponowane równanie modelowe (równanie 78 w *Autoreferacie*) zostało zapisane w układzie współrzędnych prostokątnych, podczas gdy modelowany reaktor cechuje się geometrią cylindryczną. Dodatkowo, równanie to obowiązuje dla ruchu laminarnego. Habilitant pisze o tym założeniu, ale nie podaje żadnych dowodów na to, że przepływ w reaktorze odbywa się rzeczywiście w zakresie przepływu laminarnego, a przecież można to założenie dość łatwo zweryfikować. Następny problem to znaczenie współczynnika  $D$  występującego w równaniach (78-80) – Habilitant nazywa go współczynnikiem dyfuzji, podczas gdy jest to współczynnik dyspersji osiowej, który w przepływach przez złożę z wypełnieniem przyjmuje dużo większe wartości niż współczynnik dyfuzji molekularnej. Rozstrzygnięcie, czy jest to tylko sprawa stosowanej nomenklatury, czy zasadniczy błąd merytoryczny jest niemożliwe, ponieważ Habilitant nie podaje, jak obliczał wartość tego współczynnika, ani nie podaje jego wartości. Przyjmuje jedynie bez dowodu relację:  $D \ll u$ . Z kolei zastosowanie warunków brzegowych Danckwerts'a do rozwiązania równania (80) wskazuje, że Autor rozpatruje jednak przepływ z dyspersją osiową. Wydaje mi się również, że błędny jest zapis równania (81) ponieważ dla warunku  $D/u \Rightarrow 0$  z równania tego nie można uzyskać równania (83). Niejasne jest również jak z równania (83) uzyskano równanie (84) – równ. (83) określa zależność stężenia składnika A od położenia osiowego w kolumnie, natomiast w równ. (84) zależność ta znika i uzyskuje się stałą (niezależną od osiowego położenia w reaktorze) wartość tego stężenia?!. Postać równ. (84) wskazuje, że podaje ono stężenie na wylocie z reaktora, ale Habilitant o tym nie wspomina.

Niezależnie od tych zastrzeżeń – zakładając, że wynikają one z nie dość precyzyjnego opisu – efekt podjętych działań jest pozytywny. Opracowano model, którego końcowa postać (równ. 84) umożliwia opis działania reaktora. Z wykorzystaniem tego modelu, dokonano optymalizacji działania węzła syntezy instalacji BPA oraz bezinwestycyjnego wdrożenia nowego, energooszczędnego procesu otrzymywania Bisfenolu A.

### **Synteza dorobku naukowego**

Oprócz aktywność naukowej związanej z zatrudnieniem Habilitanta w Instytucie MEXEO, wykonywał on prace badawcze w innych instytucjach naukowych. Na wyróżnienie zasługują tu prace badawcze przeprowadzone w ramach realizacji programu ScienceLink w związku z badaniami strukturalnymi próbek katalizatorów DMC. Badania te prowadzono w Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASYLAB, Deutsches Elektronen Synchrotron DESY, Research Centre of the Helmholtz Association in Hamburg (2012) oraz Synchrotron SOLEIL (2013). Następną formą tej aktywności były prace badawcze prowadzone w ramach projektu dotyczącego wytwarzania i stosowania preparatów dezynfekcyjnych do zwalczania ognisk epidemicznych drobnoustrojów chorobotwórczych w Wojskowym Instytucie Medycznym (2022-2023).

Przystępując do podsumowania pokaźnego dorobku naukowego Habilitanta należy, oprócz publikacji związanych z osiągnięciem naukowym [H1-H18], wymienić następujące dokonania:

- publikacje po uzyskaniu stopnia doktora – 14,
- publikacje przed uzyskaniem stopnia doktora – 1,
- czynny udział w konferencjach (krajowych i zagranicznych) – 44 (w tym 5 przed doktoratem),
- osiągnięcia projektowe, konstrukcyjne i technologiczne – 10,
- udział w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych – 4,
- liczba recenzowanych prac naukowych w czasopiśmie międzynarodowych - 6,
- uczestnictwo w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych – 10 (w tym 4 jako wykonawca, 3 – główny wykonawca, 3 – kierownik),
- udział w zespołach badawczych, realizujących inne projekty – 4,
- znacząca współpraca z otoczeniem społecznym i gospodarczym: dorobek technologiczny -5, współpraca z sektorem gospodarczym – 7,
- liczba patentów krajowych i międzynarodowych – 9,

- liczba wdrożonych technologii – 7,

- liczba wykonanych ekspertyz – 18.

Dorobek naukowy dr. inż. Arkadiusza Chruściela przedstawiony za pomocą wskaźników naukowych przedstawia się następująco:

- sumaryczny IF (wg JCR) = 37,623
- liczba cytowań (wg WoS) = 148
- liczba punktów MNiSW = 1035
- indeks Hirscha H (wg WoS) = 6

Wartości tych wskaźników spełniają (nawet z pewnym nadmiarem) zwyczajowe kryteria stosowane w ocenie wniosków habilitacyjnych w dyscyplinie *Inżynieria Chemiczna*.

### **Podsumowanie oceny dorobku naukowego**

Przedstawiona ocena wniosku habilitacyjnego dr. inż. Arkadiusza Chruściela wskazuje, że działalność naukowa Kandydata jest istotna dla zrozumienia zjawisk i mechanizmów w procesach związanych z technologiami ciężkiej syntezy organicznej. Zawartość merytoryczna zestawu prac składających się na osiągnięcie naukowe świadczy o wysokich kompetencjach naukowych i badawczych Kandydata, którego z pełnym przekonaniem można uznać za międzynarodowego eksperta w technologiach ciężkiej syntezy organicznej. Pan dr inż. Arkadiusz Chruściel ma w dorobku osiągnięcia naukowe stanowiące znaczący wkład w rozwój dyscypliny inżynieria chemiczna. Istotny jest również fakt, że ściśle naukowa działalność Habilitanta – w przedłożonym do oceny wniosku dotyczy to szczególnie badania wytwarzania i właściwości katalizatorów DMC – jest powiązana z praktycznymi zastosowaniami uzyskanych wyników w skali przemysłowej. Nadaje to osiągnięciom naukowym Habilitanta nowy, bardzo istotny dla nauk inżynieryjno-technicznych walor.

Działając zgodnie z zapisami Art. 221 ust. 8 Ustawy o Szkolnictwie Wyższym i Nauce z dn. 20 lipca 2018 (z późn. zmianami), stwierdzam, że spełnione zostały warunki Art. 219 ust. 1 p. 2 niniejszej Ustawy, a tym samym popieram wniosek o nadanie dr. inż. Arkadiuszowi Chruścielowi stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria chemiczna.

prof. dr hab. inż. Eugeniusz Molga

