

Prof. dr hab. Artur P. Terzyk

Wydział Chemii UMK

Gagarina 7, 87-100 Toruń

14.07.2023

**RECENZJA OSIĄGNIĘCIA NAUKOWEGO DR YAROSLAVA GROSU
PRZEDSTAWIONEGO W POSTĘPOWANIU O NADANIE TYTUŁU DOKTORA
HABILITOWANEGO**

Dr Yaroslav Grosu uzyskał tytuł magistra fizyki stosowanej w Instytucie Fizyki i Technologii, Narodowego Uniwersytetu Technicznego Ukrainy (Kijowski Instytut Politechniczny) w roku 2011. Doktorat z chemii (specjalność: chemia fizyczna) obronił na Uniwersytecie Blaise Pascal we Francji w roku 2015 r, a temat dysertacji brzmiał: Thermodynamics and Operational Properties of Nanoporous Heterogeneous Lyophobic Systems for Mechanical and Thermal Energy Storage/Dissipation. Zatem osiągnięcie przedstawione do recenzji stanowi kontynuację badań podjętych podczas realizacji doktoratu. Dr Grosu od 2020 roku zatrudniony jest na stanowisku adiunkta na Uniwersytecie Śląskim w Katowicach oraz jest liderem grupy badawczej w centrum badawczym CIC energiGUNE, Vitoria w Hiszpanii. Pełni też rolę kierownika dwóch projektów UE i jednego projektu NCN, jest stypendystą ERC oraz otrzymał stypendium dla młodych naukowców Ministra Edukacji i Nauki. Warto nadmienić, że wcześniej zatrudniony był w Hiszpanii, na Ukrainie oraz był wykonawcą kilku projektów badawczych. Posiada współpracę międzynarodową, m.in. z naukowcami z UK, Włoch, USA, Portugalii, Polski, Chin, Norwegii, Australii i Ukrainy. Poza obszarami związanymi z działalnością habilitacyjną prowadził też badania naukowe m.in. nad opracowaniem metod zapobiegania korozji ogniw fotowoltaicznych, czy magazynowaniem energii.

W obszarze działalności dydaktycznej prowadził zajęcia w Hiszpanii (Materiały i metody w magazynowaniu energii cieplnej) i na Ukrainie (Podstawy termofizyki, Technologie energetyczne dla przemysłowych procesów chemicznych, Metody i modelowanie matematyczne). Pełnił funkcję promotora 1 pracy magisterskiej, dwóch licencjackich, a także był promotorem pomocniczym jednej pracy inżynierskiej i doktorskiej.

Przed nadaniem stopnia doktora wygłosił 7 wystąpień na konferencjach międzynarodowych oraz zaprezentował 2 postery. Po nadaniu stopnia były to odpowiednio 24 wystąpienia i 6 posterów. W sumie uczestniczył (i uczestniczy) w 9 projektach finansowanych w drodze konkursów krajowych i międzynarodowych, w 4 z nich pełnił (pełni) rolę kierownika. W latach 2016 – 2019 pełnił rolę członka w Nanouptake eCOST action (European commission) – 2016 – 2019, obecnie jest członkiem komitetu redakcyjnego czasopisma Energy Storage and Saving (wydawnictwo Elsevier, bez IF i typu Open Access). Odbył jeden staż półroczny na Uniwersytecie w Birmingham (UK) oraz dwa krótkie staże jednomiesięczne na Uniwersytecie Sapienza w Rzymie oraz na zaproszenie Uniwersytetu Kalifornijskiego w Davis, USA. Recenzował znaczną ilość prac, w tym w bardzo dobrych czasopismach z dziedziny, był też recenzentem w dwóch konkursach OPUS w NCN. Jest współautorem dwóch zgłoszeń patentowych i posiada współpracę z otoczeniem społeczno – gospodarczym.

Przed nadaniem stopnia doktora opublikował 13 prac z listy JCR, po uzyskaniu stopnia doktora 24 z tej listy oraz 8 spoza niej. Łącznie (stan na 15.10.2022) posiada w dorobku 76 publikacji, o sumarycznym IF = 378.3. Widać wyraźny postęp zarówno w liczbie prac, jak i ilości cytacji po zakończeniu realizacji doktoratu. Jest to, biorąc pod uwagę staż naukowy Kandydata bardzo bogata i aktywna działalność naukowa.

Krótkie omówienie cyklu prac z kilkoma sugestiami

Na recenzowany cykl składa się 15 prac o sumarycznym IF = 116, o łącznej punktacji MNiSW = 2400. Daje to IF = 7.8 na pracę (160 punktów na pracę), co jest wynikiem bardzo dobrym. Prace te są cytowane (stan na 15.10.2022) około 130 razy (bez autocytacji). W zaledwie dwóch z nich dr Grosu nie jest pierwszym lub autorem do korespondencji, w pozostałych jest, z czego w 8 pełni podwójną rolę. Nie ulega zatem wątpliwości, że wkład doktora Grosu w powstanie recenzowanej serii publikacji jest wiodący (co zostało poparte oświadczeniami). Ważne jest też, że poza jedną – samodzielną pracą, powstały one we współpracy międzynarodowej. Prace opublikowane zostały między innymi w ACS Nano (H1, H6), ACS Nano Lett. (H2), The Journal of Physical Chemistry Letters (H3), ACS Applied Materials & Interfaces (H4, H11), Applied Surface Science (H7, H8), Applied Energy (H9). Wynika z tego że zdecydowana większość prac

opublikowana jest w czołowych czasopismach z dziedziny nanomateriałów i fizykochemii powierzchni. Nie dziwi to, bowiem głównym tematem łączącym prace jest zjawisko zwilżania i wysuszenia. Cykl artykułów naukowych Autor podzielił ze względu na główny czynnik przyczyniający się do procesu zwilżania-wysuszenia (materiał porowaty lub ciecz). Wkład Autora to: opracowanie koncepcji badań, zaplanowanie strategii eksperymentu, przeprowadzenie części badań, pisanie artykułów, wykonywanie obliczeń, analiza wyników, kierowanie pracami grupy.

Wstęp Autor poświęca zjawisku zwilżania, pochwały wymaga unikanie tego, co jest rutyną w opisie zjawiska, czyli podawania równań Wenzla i Cassiego. Wystarczającym jest opis zaproponowany przez Autora, bazujący na równaniu Younga i Younga – Laplacea, choć w świetle wyników omawianych w podrozdziale 4.3.4.2, przydatnym byłoby też omówienie równania Younga - Dupre. Po ich prezentacji w klarowny sposób omówione zostaje zjawisko intruzji – ekstruzji (pozwalające na podział układów doświadczalnych na 3 typy ze względu na obecność histerezy procesu), którego ważną determinantą jest objętość porów, podlegająca, jak wiadomo, dystrybucji biorąc pod uwagę ich średnice. I to w umiejętny i błyskotliwy sposób zauważa Autor, przechodząc w podrozdziale 4.3.2. do formalizmu termodynamicznego opisującego zjawisko. W tym miejscu można mieć jedynie pytanie, dlaczego Autor skupił się tylko na jednej funkcji rozkładu porów (było to zapewne powodowane względami matematycznymi uzyskania „eleganckich” rozwiązań analitycznych). Byłoby też ciekawym sprawdzenie owego formalizmu dla układów porowatych, o bardziej homogenicznym rozkładzie porów, jak choćby materiały typu MCM. Nie zmienia to faktu, że zaproponowane podejście pozwala Autorowi wysnuć ciekawe wnioski na temat wpływu rozkładu porów na izobaryczny współczynnik rozszerzalności cieplnej. Podejście teoretyczne zostaje w zadawalający sposób przetestowane dla dwóch układów: mezoporowatej domieszkowanej krzemionki oraz mikroporowatego MOFu. Opis teoretyczny danych doświadczalnych należy uznać za bardzo dobry, choć zarówno w pracy H13 jak i w jej Supporting Information zabrakło mi porównania rozkładu porów obu materiałów wyliczonych w oparciu o rutynową metodę niskotemperaturowej izotermy adsorpcji – desorpcji azotu, z funkcją rozkładu proponowaną przez Autora. Zwłaszcza, że mikroporowaty ZIF-8 ma ściśle zdefiniowane średnice mikroporów (0.34 i 1.16 nm). Finalnie wyniki zaprezentowane w pracach omawianych w rozdziale 4.3.2. dowodzą słuszności zaproponowanego podejścia dla opisanego danych dla wspomnianych

dwóch układów, co rodzi możliwość przewidywania współczynnika izobarycznej rozszerzalności cieplnej.

Rozdział 4.3.3. prezentuje rozważania nad wpływem elastyczności materiału porowatego na proces zwilżania/wysuszenia. Wyniki omawiane w tym rozdziale uważam za najważniejsze z całego prezentowanego cyklu. W szczególności udokumentowanie i opis możliwości termicznie indukowanego przejścia intruzja – ekstruzja, co może znaleźć duże zastosowanie praktyczne (wyniki z prac H1 - H3). Bardzo umiejętnie udowodniono, stosując metody porozymetrii cieczowej, symulacji MD i eksperyment rozpraszania neutronów SANS, że mechanizm intruzji – ekstruzji zmienia parametr sieciowy materiału ZIF-8 w sposób niejednorodny, tzn. początkowo układ kurczy się, by później – przy większym ciśnieniu ulec rozszerzeniu. Bardzo podoba mi się fakt dostrzeżenia przez autorów w pracy H2 rozbieżności ilościowej w wynikach eksperymentu i symulacji MD oraz zaproponowanie potencjalnej przyczyny w wadliwym polu siłowym stosowanym do symulacji materiału ZIF-8. Można również dodać, że zastosowany model wody (TIP4P/2005) też posiada swoje wady (warto spojrzeć na przesunięcie teoretycznych i eksperymentalnych diagramów fazowych - <https://doi.org/10.1063/1.2121687>). Co nie zmienia faktu, że praca H2 jest doskonałym połączeniem teorii i eksperymentu, prowadzącym finalnie do nanoskopowego wglądu w mechanizm całego zjawiska. Ma ono zastosowanie praktyczne w zaworach regulujących ciśnienie w mikro- i nanofluidyce (prace H2 i H3).

Rozdział 4.3.4. Autor poświęcił omówieniu prac nad wpływem topologii materiału porowatego na proces zwilżania/wysuszenia dla przypadku cieczy zwilżających i niezwilżających. Głównie Autor skupia się na roli struktury porów w istnieniu zjawiska histerezy na krzywych intruzji – ekstruzji (prace H5 – H15). W tym fragmencie, zwłaszcza przy omawianiu wyników pracy H14, przydałoby się sięgnięcie do równania Younga – Dupre. W jego świetle wyniki i konkluzje zawarte w pracy H14 uważam za średnio nowatorskie pod względem naukowym, jednak istotne z punktu widzenia praktycznego (eliminacja zjawiska pełzania cieczy w zamkniętych pojemnikach – rozwiązanie zostało opatentowane - H15).

W rozdziale 4.3.5. Autor omawia wyniki badań nad wpływem lepkości cieczy na proces zwilżania/wysuszenia. Zawarte one zostały w pracy H10, w której za najbardziej interesujące uważam wykazanie istnienia, jak i teoretyczne wyjaśnienie zależności między ciśnieniem intruzji, a lepkością cieczy. Bardzo interesujące są też wyniki prac omówionych w rozdziale

4.3.6., dotyczące zjawiska powstawania różnicy potencjałów podczas procesu zwilżania/wysuszania. Prace H4 i H11 zostały poświęcone badaniom nad procesem rozchodzenia się ciepła podczas intruzji/ekstruzji. Za najbardziej istotne uważam wykazanie, że gro tej energii przekształcana jest w energię elektryczną w procesie tryboelektryzacji. Choć sam proces jest już znany (wykorzystuje się choćby padający deszcz), nowością jest wykazanie jego obecności w zjawisku badanym przez dr Grosu. Istnienie swoistej pompy ciepła jest zapewne godne dalszych badań.

Finalnie rozdział 4.3.7. poświęcony jest interesującemu zagadnieniu wpływu CO₂ na kąt zwilżania, co odgrywa niebagatelną rolę podczas suszenia materiałów porowatych (praca H12). W pracy H12 można zgłosić zastrzeżenia co do wielkości kąta zwilżania czystej miedzi przyjętej podczas badań symulacyjnych. Wynosi on bowiem w świetle najnowszych badań 34 (<https://doi.org/10.1021/acsami.1c09733>), a nie 60 stopni. Nie znalazłem też w pracy informacji jaka płaszczyzna krystalograficzna była badana (kąt też od niej zależy). Nie zmienia to jednak faktu, że sam mechanizm został odtworzony w sposób zadawalający. Praca kończy się zaproponowaniem wykorzystania zjawiska do konstrukcji sensora uruchamianego przez zmianę ciśnienia ditlenku węgla.

PODSUMOWANIE

Prezentowany cykl prac jest ważnym osiągnięciem naukowym. Biorąc pod uwagę, że towarzyszy mu ponadprzeciętna aktywność naukowa habilitanta, nie mam najmniejszych wątpliwości, że zasługuje on na tytuł doktora habilitowanego. Mało tego, ponieważ jest bardzo aktywny na polu pozyskiwania grantów, nie mam wątpliwości, że jeśli nic nie zakłóci przebiegu kariery habilitanta w krótkim czasie będzie on ubiegał się o tytuł profesora. Zatem podsumowując stwierdzam, że w mojej ocenie przedstawione osiągnięcie naukowe dr Yaroslava Grosu spełnia (ze znacznym nadmiarem) wymagania stawiane osobom ubiegającym się o nadanie tytułu doktora habilitowanego, a określone w art. 219 ust.1 pkt 2 ustawy z dnia 20.07.2018 – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (tekst jedn. Dz.U.z 2022 r. poz. 574).

