



Warszawa, dn. 22.11.2021 r.

prof. dr hab. inż. Jerzy Choma
Instytut Chemii
Wydział Nowych Technologii i Chemii
Wojskowa Akademia Techniczna
ul. gen. S. Kaliskiego 2
00-908 Warszawa
e-mail: jerzy.choma@wat.edu.pl

RECENZJA

**osiągnięć naukowych, dydaktycznych i organizacyjnych Dr. Jakuba GOCLONA
w związku z postępowaniem w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne
prowadzonym przez Radę Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu w Białymstoku**

Podstawą recenzji dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego Dr. Jakuba Goclona była decyzja Rady Doskonałości Naukowej z dnia 11 października 2021 r. oraz Uchwała nr 13/2021 Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu w Białymstoku z dnia 21 października 2021 r. w sprawie powołania komisji habilitacyjnej w postępowaniu w sprawie nadania stopnia naukowego doktora habilitowanego Dr. Jakubowi Goclonowi w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne, pod przewodnictwem Prof. dr hab. Izabeli Nowak z Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, z moją osobą w jej składzie. Dokumentacja nagrana na pendrive i przysłana pocztą zawierała: Pliki z rozszerzeniem pdf dyplomu doktorskiego Jakuba Goclona w języku polskim i angielskim; Autoreferat w języku polskim i angielskim; Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny w języku polskim i angielskim. Wykaz ten zawierał: I. Informację o osiągnięciach naukowych albo artystycznych, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt 2a Ustawy; II. Informację o aktywności naukowej albo artystycznej; III. Informację o współpracy z otoczeniem społecznym i gospodarczym; IV. Informacje naukometryczne. Ponadto w dokumentacji znajdowało się

dziesięć plików z rozszerzeniem pdf artykułów naukowych powiązanych tematycznie składających się na osiągnięcie naukowe pt. „Badania teoretyczne struktury, własności elektronowych, reaktywności oraz stabilności termodynamicznej materiałów węglowych i ich modyfikacji”. Dalej przedstawiono również oświadczenia współautorów publikacji o ich udziale w dziesięciu najważniejszych pracach stanowiących osiągnięcie naukowe Habilitanta.

Informacje wstępne

Dr Jakub Goclon studiował w latach 1998 – 2003 na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Uzyskał stopień zawodowy magistra chemii w specjalności chemia fizyczna po obronie pracy magisterskiej pt. „Modelowanie widm elektronowych i oscylacyjnych kwasu o-hydroksybenzoesowego”. Promotorem tej pracy był Prof. dr hab. Jan Najbar. W latach 2003 – 2008 Dr Jakub Goclon był doktorantem Środowiskowego Studium Doktoranckiego w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni Polskiej Akademii Nauk w Krakowie. 18 grudnia 2008 r. obronił rozprawę doktorską pt. „Analiza termodynamiczna, właściwości elektronowe i relaksacja struktury różnych powierzchni V_2O_5 – obliczenia periodyczne” i uzyskał stopień doktora nauk chemicznych w zakresie chemii nadany uchwałą Rady Naukowej Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie. Promotorem w przewodzie doktorskim była Prof. dr hab. Małgorzata Witko.

W trakcie dotychczasowej pracy zawodowej Dr Jakub Goclon był zatrudniony: od kwietnia 2009 r. do stycznia 2010 r. w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie, gdzie odbywał staż podoktorski, od lutego 2010 r. do listopada 2015 r. w Friedrich-Aleksander University Erlangen-Nürnberg Interdisciplinary Center for Molecular Materials (ICMM) and Computer-Chemistry-Center (CCC), Erlangen, Niemcy odbywał staż podoktorski, od kwietnia 2016 r. do listopada 2018 r. na Uniwersytecie w Białymstoku na Wydziale Biologiczno-Chemicznym w Zakładzie Metod Fizykochemicznych jako specjalista naukowo-techniczny oraz od grudnia 2018 r. do chwili obecnej na Uniwersytecie w Białymstoku na Wydziale Chemii w Zakładzie Chemii Materiałów na stanowisku adiunkta.

Ocena osiągnięcia naukowego

Osiągnięciem naukowym Dr. Jakuba Goclona, stanowiącym podstawę wszczęcia postępowania habilitacyjnego był cykl dziesięciu zbliżonych tematycznie, głównie za sprawą zainteresowania nowoczesnymi materiałami węglowymi, artykułów naukowych zatytułowany

jako „Badania teoretyczne struktury, własności elektronowych, reaktywności oraz stabilności termodynamicznej materiałów węglowych i ich modyfikacji”. Wszystkie te artykuły zostały opublikowane w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JCR) o wskaźniku oddziaływania (Impact Factor IF) zmieniającym się od $IF_{2018} = 1,716$ (ChemistrySelect) do $IF_{2019} = 9,346$ (Chemical Science). Te specjalistyczne czasopisma poświęcone fizykochemicznej charakterystyce materiałów porowatych w większości należy uznać za dobre. Niektóre z nich to czasopisma bardzo dobre, jak np. Chemical Science i Carbon. Zgodnie z wynikami analizy bibliometrycznej przedstawionej przez Habilitanta dziesięć jego prac stanowiących osiągnięcie naukowe opublikowano w czasopismach znajdujących się w bazie JCR. We wszystkich tych pracach Habilitant był autorem korespondencyjnym. Sumaryczny IF czasopism według bazy JCR zgodnie z rokiem opublikowania jest bliski 48. Sumaryczna liczba punktów MEiN zgodnie z wartościami obowiązującymi od 2019 r. wynosi 1140, co odpowiada średniej wartości punktowej bliskiej 100, a więc również czasopismu ocenianemu jako dobre. Liczba cytowań tych dziesięciu publikacji (dane z 21.06.2021 r.) według bazy Scopus nie jest zbyt duża i wynosi 68, a bez autocytowań tylko 54. Wkład Dr. Jakuba Goclona w powstanie każdej z dziesięciu prac był wiodący i jak deklaruje sam Habilitant mieścił się on w przedziale od 75 % do 100 %. Moją uwagę zwróciła praca J. Goclon, B. Bankiewicz, P. Kolek, K. Winkler opublikowana w czasopiśmie Carbon, 176, 198-208, 2021. Habilitant ocenił wkład własny na 75 %. Skoro Prof. dr hab. Krzysztof Winkler ocenił swój udział na 10 %, a Dr Barbara Bankiewicz w swoim oświadczeniu stwierdziła, że jej udział cyt. „polegał na wykonaniu prawie wszystkich obliczeń DFT(B3LYP) za pomocą programu Gaussian16 (oprócz układów $C_{60}@C_{240}$ i N^{II}) oraz wizualizacji i dyskusji otrzymanych wyników”, natomiast Dr Przemysław Kolek oświadczył, że jego udział cyt. „związany był z dyskusją struktury nanorurek węglowych w oparciu o dane literaturowe z punktu widzenia spektroskopii (głównie IR i Raman) oraz na analizie części wyników” to moim zdaniem wkład Dr. J. Goclona jest zawyżony. Tym niemniej z przedstawionych wszystkich oświadczeń współautorów innych prac wynika, że Dr Jakub Goclon miał decydujący wpływ na ich powstanie. Jego udział polegał najczęściej na tym, że prace powstawały w oparciu o jego pomysły. Dokładnie określał cel badań, przeprowadzał przegląd literatury, wykonywał większość obliczeń metodą DFT, miał wiodący udział w analizie, dyskusji i opracowaniu wyników oraz najczęściej przygotowywał manuskrypt. Dodatkowo prowadził korespondencję z edytorem czasopisma i recenzentami oraz przygotowywał ostateczną wersję publikacji.

Zainteresowania naukowe Dr. Jakuba Goclona, po uzyskaniu stopnia doktora, dotyczyły komputerowego modelowania i charakterystyki fizykochemicznych właściwości najnowszych materiałów węglowych takich jak: nanorurki, grafen, nanocebunki czy grafitopodobny azotek węgla ($g\text{-C}_3\text{N}_4$). Do opisu tych materiałów najczęściej stosował metodę wynikającą z teorii funkcjonału gęstości (DFT – Density Functional Theory). Za bardzo wartościowe w podejściu Habilitanta należy uznać to, że w swoich badaniach wykorzystywał nie tylko indywidualne materiały węglowe, ale również materiały, które poddano procesom modyfikacji oraz materiały węglowe w kompozytach z udziałem polimerów. Pisząc bardziej szczegółowo Habilitant w dziesięciu swoich najważniejszych artykułach zajmował się: jednościennej nanorurkami węglowymi (SWCNTs – Single Walled Carbon Nanotubes) modyfikowanych kowalencyjnie za pomocą cząsteczek organicznych i niekowalencyjnie za pomocą cząsteczek polimerów poliuretanowych, zdefektowanymi jednościennej nanorurkami węglowymi modyfikowanymi grupami karboksylowymi, wielowymiarowymi (1D, 2D i 3D) polimerami organicznymi składającymi się z cząsteczek fulerenów z przyłączonymi atomami palladu – C_{60}Pd_n ($n = 1, 2$ lub 3) oraz układami kompozytowymi zbudowanymi z polipirołu jako podstawnika przyłączonego do wielowymiarowego polimeru organicznego C_{60}Pd_n . Układy te reprezentują organiczne złącza typu p-n. Ponadto Habilitant badał modelując komputerowo nanocebunki węglowe (CNOs – Carbon Nano-Onions) domieszkowane atomami boru i azotu. Ciekawe rezultaty otrzymał badając stechiometryczny i zdefektowany grafitopodobny azotek węgla ($g\text{-C}_3\text{N}_4$) jako fotokatalizator w reakcji redukcji tlenu do nadtlenu wodoru oraz reakcji selektywnego utleniania alkoholu benzyłowego do aldehydu benzooesowego.

Trochę szkoda, że Habilitant w swoich badaniach nie zajął się analizą fizykochemicznych właściwości nanowłókien węglowych jako składników materiałów kompozytowych niezwykle ważnych z punktu widzenia współczesnej inżynierii materiałowej. Może tym zagadnieniem warto zająć się w najbliższej przyszłości.

Podstawowym celem pracy Dr. Jakuba Goclona było poszukiwanie nowych fizykochemicznych właściwości materiałów węglowych. Starał się on również weryfikować uzyskane przez siebie wyniki z wynikami eksperymentalnymi opisanymi w literaturze. Trzeba przyznać, że nie zawsze było to łatwe, a niekiedy wręcz niemożliwe. Na przykład Habilitant z powodzeniem starał się wyjaśnić reaktywność i selektywność wytypowanych materiałów węglowych w kilku reakcjach chemicznych oraz badać wpływ defektów tych materiałów na przebieg i kinetykę tych reakcji. Chciałbym podkreślić, że w mojej opinii cele jakie postawił przed sobą Habilitant zostały osiągnięte.

Do najważniejszych osiągnięć badawczych Dr. Jakuba Goclona związanych z jego postępowaniem habilitacyjnym zaliczam:

- 1) Poznanie właściwości modyfikowanych kowalencyjnie za pomocą 4,4'-diizocyjanianu difenylometanu (MDI) oraz 2,4-diizocyjanianu toluilenu (TDI) jednościennych nanorurek węglowych. Stwierdzono łączenie się tych cząsteczek modyfikatorów z powierzchnią nanorurek za pomocą wiązań amidowych. Oceniono wpływ oddziaływań van der Waalsa, wiązań π - π oraz wiązań wodorowych na trwałość tak modyfikowanych nanorurek węglowych.
- 2) Ocenę reaktywności zdefektowanych punktów nanorurek węglowych w stosunku do grup karboksylowych.
- 3) Zdefiniowanie struktury geometrycznej polimerów jedno-, dwu- i trójwymiarowych składających się z cząsteczek fulerenów C_{60} oraz atomów palladu oraz określenie najkorzystniejszych energetycznie aspektów wiązania C-Pd.
- 4) Zaproponowanie mechanizmu oddziaływania polimerów poliuretanowych z powierzchnią jednościennych nanorurek węglowych z wykorzystaniem dynamiki molekularnej. Wyznaczenie zależności pomiędzy średnicą nanorurki a energią oddziaływania tej nanorurki z cząsteczką polimeru poliuretanowego.
- 5) Wyjaśnienie obserwowanej większej reaktywności ujemnie naładowanych jednościennych nanorurek węglowych o właściwościach metalicznych względem tych o właściwościach półprzewodnikowych na podstawie reakcji z solami diazoniowymi. Obserwacje te porównano z danymi eksperymentalnymi.
- 6) Wyjaśnienie mechanizmów reakcji redukcji tlenu do nadtlenu wodoru oraz reakcji selektywnego utleniania alkoholu benzyłowego do aldehydu benzoowego w obecności tlenu na powierzchni stechiometrycznej i zdefektowanej grafitopodobnego azotku węgla ($g-C_3N_4$) pod wpływem promieniowania ultrafioletowego.
- 7) Szczegółową fizykochemiczną charakterystykę nanocebulek węglowych domieszkowanych atomami boru i azotu, zarówno tych o strukturze stechiometrycznej jak i zdefektowanej.

Podsumowując ten fragment recenzji dotyczący osiągnięcia naukowego chciałbym podkreślić, że uzyskane i opublikowane przez Dr. Jakuba Goclona teoretyczne wyniki dotyczące fizykochemicznej charakterystyki nowoczesnych materiałów węglowych są wartościowe także z tego powodu, że mogą być one wykorzystane do otrzymania

rzeczywistych materiałów, które będzie można zastosować w realnych procesach. Dorobek zaprezentowany w postaci dziesięciu oryginalnych prac jest dobry i wystarczający na to, aby ubiegać się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne. Tym niemniej muszę zwrócić uwagę Habilitantowi na to, że zbyt małą uwagę poświęcił starannej korekcie przygotowanej przez siebie dokumentacji. Napotkać można błędne sformułowania jak chociażby na str. 1 autoreferatu – pracuje Pan na Wydziale Chemii, a nie na Wydziale Chemicznym Uniwersytetu w Białymstoku, na str. 4 – wyjaśnienie reaktywności kilku reakcji chemicznych - reaktywność może dotyczyć substratu a nie reakcji chemicznej, na str. 5 zamiast pololi winno być polioli, na str. 7 napisał Pan o utworzeniu się wielu wiązań wodorowych o różnej mocy, winno być o różnej energii itp. W dokumentacji napotkać można także wiele błędnych wyrazów i literówek. Już na str. 0 zamiast słowa postępowania winno być postępowania. Na str. 2 nie było potrzeby dwukrotnego rozwijania akronimu DFT (ang. density functional theory). Czy na str. 5 zamiast słowa dwoma lepiej było napisać dwiema grupami hydroksylowymi. Na usprawiedliwienie chciałbym dodać, że obie formy są poprawne, ale ta druga jest bardziej wyrazista, jednoznacznie wskazująca na rodzaj żeński. Wymieniłem tylko niektóre uchybienia.

Ocena aktywności naukowej

Uważam, że łączny parametryczny dorobek naukowy Dr. Jakuba Goclona jest zadowalający, gdyż przedstawia się on następująco: jest autorem i współautorem 28 artykułów naukowych w czasopismach znajdujących się w bazie JCR z tego po doktoracie 26. Biorąc pod uwagę, że prace te powstały w latach 2009 – 2021 daje to średnio dwie teoretyczne prace rocznie. Co w mojej ocenie jest wynikiem dość przeciętnym. Sumaryczny wskaźnik oddziaływania (Impact Factor IF) zgodnie z rokiem opublikowania artykułu jest bliski 115, a liczba cytowań tych prac według bazy Scopus wynosi 261 (bez autocytowań 233). Liczba ta jest zaledwie zadowalająca. Indeks Hirscha według bazy Scopus jest równy 11, co także potwierdza moją zadowalającą ocenę aktywności naukowej Dr. J. Goclona.

Oprócz dziesięciu artykułów, które zostały włączone do cyklu publikacji stanowiących podstawę wszczęcia postępowania habilitacyjnego Dr J. Goclon opublikował po doktoracie szesnaście artykułów w takich recenzowanych czasopismach jak np. *Electrochimica Acta* (IF₂₀₁₉ = 6,215), *Applied Surface Science* (IF₂₀₁₉ = 6,128), *Journal of Hazardous Materials* (IF₂₀₁₆ = 6,065), *Inorganic Chemistry* (IF₂₀₁₉ = 4,825), *Materials Science of Engineering: B*

(IF₂₀₁₉ = 4,706), Microporous and Mesoporous Materials (IF₂₀₁₉ = 4,551), Journal of Physical Chemistry C (IF₂₀₁₈ = 4,309) i innych o mniejszych wartościach IF.

Niektóre z prac opublikowanych z udziałem Dr. Jakuba Goclona były dobrze cytowane. Wśród najczęściej cytowanych prac opublikowanych po doktoracie, należy wymienić:

- 1) J. Goclon, R. Grybos, M. Witko, J. Hafner, Relative stability of the low-index V₂O₅ surfaces: a density functional investigation, J. Phys.: Condens. Matter, 21, 095008-1-8, 2009 – 40 cytowań.
- 2) J. Goclon, R. Grybos, M. Witko, J. Hafner, Oxygen vacancy formation on low-index V₂O₅ surfaces: A density functional investigation, Phys. Rev. B, 79, 075439-1-14, 2009 – 33 cytowania.
- 3) M. Kozłowska, J. Goclon, P. Rodziewicz, Intramolecular hydrogen bonds in low-molecular-weight polyethylene glycol, ChemPhysChem, 17, 1143-1153, 2016 – 18 cytowań.

Dla większości pozostałych omawianych prac liczba cytowań jest mniejsza od 10.

Dr J. Goclon pełnił rolę recenzenta artykułów naukowych w liczących się czasopismach międzynarodowych z listy JCR. Dotychczas napisał 14 recenzji między innymi w takich czasopismach jak: Molecular Catalysis (3), Applied Surface Science (3), ChemSusChem (1), Journal of Nanostructure in Chemistry (1), Molecules (1) i innych. To ważny obszar działalności naukowej Dr. J. Goclona, który dobrze oceniam.

Podczas całej swojej pracy naukowej Dr Jakub Goclon uczestniczył albo prezentowane były efekty jego badań na 32 międzynarodowych i krajowych konferencjach naukowych. Przedstawiono 12 komunikatów ustnych w tym 5 zaprezentował osobiście, pokazano 18 posterów oraz Habilitant wygłosił 2 wykłady na zaproszenie. Moim zdaniem do najbardziej wartościowych należy zaliczyć wykład na zaproszenie:

- 1) J. Goclon, Structural, electronic and thermodynamic properties of YBaCo₄O_{7+σ} from DFT+U calculations, Białystok, 15.04.2014 r.
oraz komunikat ustny:
- 2) J. Goclon, B. Meyer, DFT study of the interaction of hydrogen with stepped ZnO surfaces, DPG Spring Meeting, 25 – 30.03.2012 r., Berlin, Niemcy.

W czasie całej swojej pracy naukowej Dr J. Goclon uczestniczył jako wykonawca w realizacji pięciu projektów badawczych. Niestety nie kierował żadnym takim projektem. Ostatnio, w 2019 r. ubiegał się o otrzymanie projektu z Narodowego Centrum Nauki w konkursie OPUS 18 niestety bez powodzenia.

Chciałbym podkreślić, że Dr Jakub Goclon odbył łącznie pięć staży zagranicznych, w tym trzy przed i dwa po doktoracie. Najdłuższy był staż podoktorski w Friedrich-Alexander University Erlangen-Nürnberg Interdisciplinary Center for Molecular Materials (ICMM) and Computer-Chemistry-Center (CCC), Erlangen, Niemcy i trwał od lutego 2010 r. do listopada 2015 r. Nie mam najmniejszych wątpliwości, że staże te należy uznać za cenne, gdyż przyczyniły się do rozwoju naukowego Dr. Jakuba Goclona.

Ocena dorobku dydaktycznego, organizacyjnego i w zakresie popularyzacji nauki

Dr Jakub Goclon rozpoczął realizację procesu dydaktycznego w 2011 r. kiedy przebywał na stażu podoktorskim w ICMM-CCC w Erlangen w Niemczech. Prowadził tam niewielką liczbę 30 godz. rocznie ćwiczeń komputerowych z przedmiotu pt. „Modeling of catalytic processes” dla studentów III roku chemii.

Dydaktykę z prawdziwego zdarzenia rozpoczął w 2016 r. po zatrudnieniu na Uniwersytecie w Białymstoku. Można więc stwierdzić, że Dr J. Goclon jest młodym nauczycielem akademickim. Prowadził i prowadzi wykłady z następujących przedmiotów:

- 1) Modelowanie molekularne – 15 godz. dla studentów I roku I stopnia na kierunku chemia;
- 2) Molecular modeling – 15 godz. w języku angielskim dla studentów programu Erasmus;
- 3) Matematyka – 15 godz. dla studentów I roku I stopnia na kierunku ochrona środowiska oraz bezpieczeństwo i jakość środowiska;
- 4) Podstawy programowania w Pythonie – 15 godz. dla studentów I roku II stopnia na kierunku chemia;
- 5) Zastosowanie metod chemii teoretycznej – 3 godz. dla specjalizacji „Metody identyfikacji w chemii sądowej A” dla III roku kierunku chemia.

Ponadto Dr J. Goclon prowadził i prowadzi konwersatoria i laboratoria komputerowe z takich przedmiotów jak: matematyka (15 godz.), matematyka 0 (30 godz.), obliczenia chemiczne II (30 godz.), podstawy programowania w Pythonie (15 godz.), zastosowanie matematyki w chemii (30 godz.), modelowanie molekularne II (30 godz.), programming languages (15 godz.), zastosowanie matematyki w kryminalistyce (30 godz.), physical

chemistry I (30 godz.), zastosowanie metod chemii teoretycznej (3 godz.), badanie wiązań wodorowych metodą spektroskopii IR (4 godz.), analiza lipidów z wykorzystaniem spektroskopii absorpcyjnej w podczerwieni (4 godz.).

O tym, że Dr J. Goclon jest początkującym nauczycielem akademickim świadczy także fakt, że nie był on jeszcze promotorem prac licencjackich i magisterskich. Nie był także promotorem pomocniczym w przewodzie doktorskim.

Jeśli chodzi o dorobek organizacyjny to on również jest bardzo skromny. Dr J. Goclon brał udział w organizacji międzynarodowej konferencji 3rd School on Catalysis, 21 – 26.09.2004 r. w Ustroniu pod auspicjami Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie. Ponadto prowadził prezentacje dla młodzieży szkolonej z okazji Dnia Otwartego w IKiFP PAN w Krakowie w latach 2004, 2006 – 2008 dotyczące zastosowań chemii teoretycznej.

Wniosek końcowy

Mając na uwadze osiągnięcia naukowe opublikowane w większości w bardzo dobrych i dobrych czasopismach międzynarodowych stwierdzam, że Dr Jakub Goclon spełnia wymagania Ustawy 2.0 z dnia 20 lipca 2018 r. „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” stawiane przy ubieganiu się o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne. Po uzyskaniu stopnia doktora Dr Jakub Goclon zgromadził wystarczający dorobek naukowy, a jego teoretyczne osiągnięcia przyczyniły się do rozwoju wiedzy o fizykochemicznych właściwościach nowoczesnych materiałów węglowych. Dlatego wnioskuję o dopuszczenie Dr. Jakuba Goclona do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

