



UNI WERSYTET  
O P O L S K I

WYDZIAŁ CHEMII

ul. Oleska 48, 45-052, Opole  
tel. 077 452 71 00  
fax 077 452 71 01  
chemia@uni.opole.pl  
www.chemia.uni.opole.pl

Prof. dr hab. Teobald Kupka

7 Grudnia 2021

## OCENA

**dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego  
Pana doktora Jakuba Goclona oraz jego osiągnięcia naukowego  
pt. "Badania teoretyczne struktury, własności elektronowych,  
reaktywności oraz stabilności termodynamicznej materiałów  
węglowych i ich modyfikacji", stanowiącego podstawę jego wniosku  
o postępowanie habilitacyjne**

### 1. Informacje ogólne

Pierwiastek węgiel zajmuje szczególne miejsce w układzie okresowym. Początkowo chemicy ekscytowali się niezliczoną ilością poznawanych związków organicznych. Tylko trzy formy alotropowe pierwiastka węgiel, tj. diament, grafit i bezpostaciowa sadza były uznawane. Mniej lub bardziej „zanieczyszczony” pierwiastek węgiel w formie torfu, węgla brunatnego, kamiennego i antracytu był głównym źródłem energii ciepłej. Z kolei grafit, wykazywał dobre przewodnictwo elektryczne i ścieralność pozwalającą na jego powszechne stosowanie w ołówkach. Odkrycie nanorurek węglowych, fullerenów i grafenu zapoczątkowało nową erę zainteresowania „węglem”, głównie w chemii i fizyce nowych materiałów. W tym przypadku trudno było mówić o typowej syntezie chemicznej, prowadzącej do otrzymania pojedynczego produktu o ściśle określonych właściwościach fizyko-chemicznych. Nastąpiła też zmiana

narzędzi badawczych. Modelowanie molekularne, oparte na chemii teoretycznej, zostało zamienione na analizę fragmentów strukturalnych wyciętych z jedno-, dwu- i trójwymiarowych struktur. Obliczenia teoretyczne dla takich skończonych struktur często zawodziły w pełnym opisie wielkich układów periodycznych. Dopiero podejście „periodyczne” pozwoliło na uzyskanie pełniejszego obrazu. Narzędziem do tych prac stała się teoria funkcjonału gęstości. Niestety, wybór funkcjonału gęstości jest trudny i zależy od opisywanego parametru, tj. można powiedzieć o pewnym półempirycznym charakterze takich prac.

Od szeregu lat obserwuje się wielkie nadzieje związane z produkcją nowych materiałów, w tym funkcjonalizowanych nanorurek węglowych, grafenów i fullerenów w czystej formie lub ich kompozytów w matrycach polimerowych. Projektowanie takich układów ściśle wiąże się z poznaniem ich struktury geometrycznej i elektronowej a następnie kontrolowaną modyfikacją. Ten ostatni proces często opiera się na funkcjonalizowaniu niekowalencyjnym i kowalencyjnym, wymianie/dopowaniem wybranych atomów węgla, np. azotem lub borem. Do takich badań dobrze nadaje się modelowanie molekularne. Recenzowana praca habilitacyjna Pana dr Jakuba Goclona mieści się w powyżej wspomnianej tematyce badawczej i głównie skupia się na teoretycznym wyznaczeniu struktury geometrycznej oraz parametrów energetycznych w szeregu materiałów węglowych.

## 2. Sylwetka naukowa Autora Wniosku

Pan doktor Jakub Goclon całe swoje wczesne życie naukowe spędził w Krakowie. Z jego Autoreferatu dowiadujemy się, o jego studiach magisterskich na kierunku chemia (Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego) w latach 1998 - 2003. Tam też obronił swoją pracę magisterską pt. **Modelowanie widm elektronowych i oscylacyjnych kwasu o-hydroksybenzoesowego** pod kierunkiem profesora dr hab. Jana Najbara w Zespole Badań Fotochemicznych i Luminescencyjnych. Swój pierwszy etap kariery naukowej zakończył w czerwcu 2003 uzyskując tytuł **magistra chemii ze specjalności chemia fizyczna**. Następne pięć lat, tj. do roku 2008, spędził w Środowiskowym Studium Doktoranckim w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk w Krakowie.

W grudniu 2008 roku obronił tytuł doktora nauk chemicznych pod kierunkiem Pani Profesor dr hab. Małgorzaty Witko. Jego praca doktorska nosiła tytuł **Analiza termodynamiczna,**

## właściwości elektronowe i relaksacja różnych powierzchni $V_2O_5$ – obliczenia periodyczne.

Interesujący jest fakt, iż przed swoją obroną doktorską podjął pracę na „drugim końcu Polski” jako specjalista naukowo-techniczny na Uniwersytecie w Białymstoku (Wydział Biologiczno-Chemiczny, Zakład Metod Fizykochemicznych), a następnie jako adiunkt – na Uniwersytecie w Białymstoku (Wydział Chemiczny, Zakład Chemii Materiałów).

Ten krok w jego życiu zawodowym ściśle wiązał się z jego doświadczeniami nabytymi w trakcie odbywania stażów podoktorskich (lepiej mi tu brzmi angielskie wyrażenie jako postdoc). Pierwszy staż odbył w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk w Krakowie (od kwietnia 2009 do stycznia 2010) a drugi, zagraniczny w Niemczech (Erlangen, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg Interdisciplinary Center for Molecular Materials (ICMM) and Computer-Chemistry-Center (CCC)). Drugi staż był stosunkowo długi (od lutego 2010 do listopada 2015).

Warto również zauważyć, iż jeszcze w trakcie studiów doktoranckich Pan Goclon przebywał na prestiżowym stypendium (Marie Curie Fellowship, 9 miesięcy) na Uniwersytecie Wiedeńskim w zespole Profesora Jürgena Hafnera. Następnie, od 2010 pracował w Erlangen (Uniwersytet Friedrich-Alexander w Niemczech).

Na podstawie powyższych zestawień można zauważyć, iż stosunkowo dobrze przedstawia się wczesna mobilność naukowa Autora Wniosku.

Teraz chciałbym omówić krótko wyniki badań naukowych Pana doktora Goclona opublikowane w czasopismach o zasięgu ogólnosiwiatowym (**Journal Citation Reports, JCR**) oraz lokalnym. Na początku chciałbym podzielić się moim spostrzeżeniem o charakterze pracy badawczej Autora Wniosku, uwidocznionym w udostępnionych materiałach. Jest on typem „team worker”, wykonującego pracę w zespole.

Wśród 10 prac zaliczanych do cyklu habilitacyjnego H1 - H10 Pan doktor jest autorem korespondencyjnym w każdej z nich (oświadczenia współautorów potwierdzają wiodący udział Habilitanta w powstaniu tych publikacji, szacowany na ok. 85%). Ważnym faktem jest stosunkowo krótki okres publikowania prac z cyklu habilitacyjnego (2015-2021). Prace te są opublikowane w bardzo dobrych czasopismach na pograniczu chemii i fizyki oraz teoretycznej chemii materiałowej (średni współczynnik wpływu IF wynosi 4.8, 1140 punktów MNiSW, 54 cytowań bez autocytowań oraz indeks Hirscha 5). Liczby te dobrze świadczą o ważności tematyki badawczej i doskonałym opanowaniu warsztatu pracy Autora.

Oprócz publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego (H1 – H10) jest on autorem dwóch prac przed doktoratem, oraz 15 publikacji po doktoracie (pozycje A3 - A18). W tym

miejscu warto zastanowić się czy tak doświadczony i „wydajny” naukowiec nie powinien wysłać kilka prac monoautorskich (wyjątek stanowi praca H9) ? Czy to sprawa skromności? Patrząc na wykaz dokonań naukowych od 2003 roku do dnia 21 czerwca 2021 r. zauważamy 28 publikacji, w tym 14 w których Habilitant jest autorem korespondencyjnym. Całkowity IF wynosi 115 (średni 4.1) co odpowiada 3000 punktom Ministerstwa. Kolejne dwa wskaźniki za stosunkowo wysokie – Indeks Hirscha 11 i liczba cytowań 233 (257 wg scopus’a w dniu 7 Grudnia 2021).

Wystąpienia konferencyjne (postery i prezentacje ustne) mniej wnoszą do osiągnięć naukowych. Mimo tego warto zauważyć 15 wystąpień konferencyjnych Autora przed doktoratem i 17 po doktoracie. Po doktoracie Autor prezentuje wyniki badań głównie w formie komunikatów ustnych. Wśród nich były dwa wykłady na zaproszenie.

Poado, istotny jest udział Pana Goclona w projektach badawczych, poczynając od czasów przed uzyskaniem tytułu doktora (Teoretyczne badania heterogeniczności powierzchni katalizatorów na bazie tlenków wanadu”, Grant KBN N204 024 31/0475 w latach 2006-2009, wykonawca). Był również wykonawcą trzech projektów niemieckich oraz jednego z NCN w latach 2017-2020. Zgłosił również projekt OPUS 18 który nie uzyskał finansowania.

Od roku 2012 Pan doktor Jakub Goclon jest członkiem Deutsche Physikalische Gesellschaft e.V.

W roku 2019 został wyróżniony indywidualną Nagrodą Jego Magnificencji Rektora Uniwersytetu w Białymstoku - za pracę naukową.

### **3. Działalność organizacyjna i dydaktyczna Autora Wniosku**

Pan dr Jakub Goclon aktywnie angażował się w prace organizacyjne konferencji „3rd School on Catalysis”, 21-26 IX 2004 Ustroń, organizowanej przez Instytut Katalizy I Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk (IKiFP PAN).

O uznaniu środowiska naukowego dla poziomu prac badawczych Pana dr Jakuba Goclona świadczy również liczba 14 recenzowanych manuskryptów, nadesłanych do wiodących redakcji z zakresu nowych materiałów. Jest również autorem recenzji mgr. Macieja Baradyna, pt. “Opracowanie metody wyznaczania stałych szybkości reakcji dla klas reakcji bez bariery energetycznej” w ramach konkursu Badania Młodych Naukowców (BMN). Jest on również Przedstawicielem Wydziału Chemii Uniwersytetu w Białymstoku do Legii Akademickiej.

Już wcześniej, w latach 2011 - 2014 Autor prowadził po angielsku ćwiczenia w laboratorium komputerowym (30 godz.) pt. “Modeling of catalytic processes” w Friedrich-Alexander-

Universität Erlangen-Nürnberg Interdisciplinary Center for Molecular Materials (ICMM) and Computer-Chemistry-Center (CCC) w Erlangen (Niemcy) dla studentów III roku Chemii.

Aktualnie Pan dr Goclon jest również bardzo zaangażowany w proces dydaktyczny Wydziału Chemii UŁ. Poczynając od zajęć z matematyki i modelowania molekularnego po ćwiczenia laboratoryjne ze spektroskopii prowadzi(ł) 14 różnych przedmiotów na Wydziale Chemii Uniwersytetu w Białymstoku. W mojej ocenie jest to bardzo duże obciążenie dydaktyczne.

Ponadto, w latach 2004, 2006, 2006 i 2006 prowadził prezentacje z zastosowań chemii teoretycznej dla młodzieży szkolnej z okazji Dnia Otwartergo IkiFP PAN

#### **4. Ocena osiągnięcia naukowego**

##### **4A. Ocena formalna rozprawy habilitacyjnej**

Pan doktor Jakub Goclon zaproponował cykl 10 spójnych tematycznie publikacji (H1-H10) jako swoje osiągnięcie naukowe pt. "Badania teoretyczne struktury, własności elektronowych, reaktywności oraz stabilności termodynamicznej materiałów węglowych i ich modyfikacji". Publikacje H1 – H10 opublikował w latach 2015-2021, po uzyskaniu stopnia doktora chemii, w czasopismach o profilu teoretycznym i z chemii nowych materiałów, specjalizujących się w modelowaniu molekularnym i badaniach strukturalnych. Czasopisma te charakteryzują się stosunkowo wysokim współczynnikiem oddziaływania ( $IF > 2$ ). Sumaryczny IF osiągnięcia naukowego Pana Jakuba jest bardzo wysoki (4.8), liczy ponad 50 cytowań (bez autocytowań) i współczynnik Hirscha 5.

Podsumowując mogę z przyjemnością stwierdzić, iż badania teoretyczne uporządkowanych materiałów węglowych, a szczególnie ich parametrów energetycznych i spektroskopowych w wykonaniu Autora wniosku znacznie poszerzyły zakres wiedzy dotyczącej parametrów strukturalnych i energetycznych (w tym przerwy energetycznej, słabych oddziaływań niekowalencyjnych i aspektów katalitycznych).

##### **4B. Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej**

Z przysłanego mi do oceny Autoreferatu i dorobku naukowego mogę stwierdzić, iż w kilka lat po uzyskaniu tytułu magistra chemii a następnie stopnia doktora nauk chemicznych Pan doktor Jakub Goclon w pełni wykorzystał swoją wiedzę nabytą w wiodących ośrodkach naukowych w kraju w zakresie chemii teoretycznej i jej zastosowań w chemii i fizyce nowych

materiałów oraz w katalizie. Habilitant zastosował Teorię Funkcjonału gęstości (DFT), głównie w formie periodycznej, do opisu różnorodnych struktur węglowych (a nie typowych związków organicznych). Analizował ich strukturę geometryczną, efekty energetyczne oraz elektronowe. Istotna była również charakterystyka teoretyczna niekowalencyjna i kowalencyjna funkcjonalizacja materiałów węglowych. Zastosowane podejście do powtarzających się elementów strukturalnych umożliwiło wiarygodne modelowanie wybranych układów węglowych.

Z pewnym niedosytem zauważam jednak pewne pominięcie milczeniem modelowania układów skończonych oraz brak bardziej szczegółowego modelowania parametrów spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego. Ta ostatnia technika badawcza jest również stosowana w badaniach nanorurek węglowych, fullerenów i grafenów. W tym ostatnim przypadku warto wspomnieć o modelu Lerfa-Klinowskiego tlenku grafitu przed odkryciem grafenu. To wydarzenie zaowocowało przyznaniem nagrody Nobla (Geim i Nowosielov). Właśnie badania NMR ciała stałego pozwoliły na zaproponowanie sumarycznej struktury, obecnie uznawanej za model tlenku grafenu. Tu warto wspomnieć, iż 8 Grudnia 2021 Uniwersytet Warszawski przyznaje doktorat „Honoris Causa” Profesorowi Jackowi Klinowskeimu jako wyraz uznania za jego osiągnięcia naukowe.

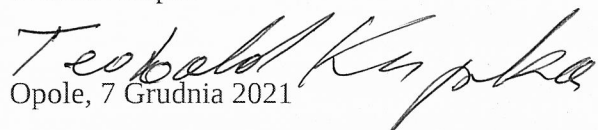
Chciałbym jednak zauważyć, iż powyższe uwagi, bardzo subiektywne lub krytyczne nie umniejszają bardzo pozytywnego wrażenia z lektury Autoreferatu i pozostałych materiałów Wniosku Pana doktora Jakuba Goclona.

## 5. Podsumowanie

Na zakończenie mojej oceny wniosku habilitacyjnego oraz osiągnięć naukowych, dydaktycznych i organizacyjnych, a szczególnie zestawu 10 spójnych tematycznie publikacji, chciałbym podkreślić istotny wkład Pana doktora Jakuba Goclona w poszerzenie naszej wiedzy o uporządkowanych materiałach węglowych, projektowaniu i kontroli ich właściwości fisyko-chemicznych oraz spełnienie ustawowych (ROZPORZĄDZENIE MINISTRA NAUKI I SZKOLNICTWA WYŻSZEGO Z DNIA 20.07.2018 R. W SPRAWIE SZCZEGÓŁOWEGO TRYBU W POSTĘPOWANIU HABILITACYJNYM (DZ. U. z 2020 r., poz. 85 z późn. zm.)) i zwyczajowych kryteriów stawianych przed kandydatami ubiegającymi się o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych w dyscyplinie chemia. **Stwierdzam, iż jednoznacznie i pozytywnie oceniam Wniosek Pana doktora Jakuba Goclona o wszczęcie postępowania habilitacyjnego z dnia 25 Czerwca**

2021 r. Zwracam się z uprzejmą prośbą do Wysokiej Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu w Białymstoku o dopuszczenie do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego Autora Wniosku.

Teobald Kupka

  
Opole, 7 Grudnia 2021

Tel. 665 921 475; e-mail:

[teobaldk@gmail.com](mailto:teobaldk@gmail.com); [teobald@uni.opole.pl](mailto:teobald@uni.opole.pl)