

Prof. dr hab. Grzegorz Sulka
Zakład Chemii Fizycznej i Elektrochemii
Zespół Elektrochemii
ul. Gronostajowa 2
30-387 Kraków



**Uniwersytet Jagielloński
w Krakowie**

Kraków, 15.05.2023 r.

OCENA
osiągnięcia naukowego zatytułowanego
„Właściwości podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz
elektroda – stopiona sól”
oraz aktywności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej dr. Jacka Kłosa
w związku z postępowaniem o nadanie stopnia naukowego doktora
habilitowanego

Informacje ogólne

Dr Jacek Kłós ukończył studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, a następnie w tej samej jednostce realizował studia doktoranckie w latach 1999 – 2004. W roku 2004 obronił pracę doktorską pt. *„Wyznaczanie parametrów molekularnych za pomocą analizy globalnej zaników fluorescencji”* wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. Andrzeja Molskiego. Po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych Pan dr Jacek Kłós został zatrudniony na stanowisku specjalisty ds. wdrażania modeli TQM w Wielkopolskim Instytucie Jakości. W latach 2006 – 2019 pracował na stanowisku adiunkta, a od 2019 roku na stanowisku inżynierjno-technicznym na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu.

Na początku kariery naukowej Pan dr Jacek Kłós zajmował się badaniem właściwości luminescencyjnych akrydyny, a począwszy od studiów doktoranckich zainteresowania badawcze ukierunkował na problemy związane z modelowaniem zjawisk chemicznych. W ramach pracy doktorskiej zajmował się wyznaczaniem wartości parametrów molekularnych modelu Smoluchowskiego – Collins – Kimballa opisującym wygaszanie fluorescencji. Po obronie rozprawy doktorskiej poszerzył swoje zainteresowania badawcze o badanie właściwości glasonomerowych wypełnień dentystycznych, a modelowanie zastosował do opisu własności fizykochemicznych podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda metaliczna/sól stopiona. To ostanie

zagadnienie stanowi cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych zgłoszonych jako osiągnięcie naukowe w postępowaniu habilitacyjnym.

Ocena osiągnięcia naukowego

Na przedstawiony do oceny dorobek będący podstawą procedury habilitacyjnej składa się 8 oryginalnych prac H1 – H8, opublikowanych w latach 2008 – 2021 w czasopiśmie z listy Journal Citation Report (JCR). Prace te ukazały się w dobrych i bardzo dobrych czasopiśmie naukowych takich jak: *Electrochimica Acta* (3 prace), *Journal of Chemical Physics* (4 prace) i *Journal of Physical Chemistry C* (1 praca). Współczynnik oddziaływania czasopism (IF zgodny z rokiem wydania), w których opublikowano prace z cyklu habilitacyjnego waha się od 2,942 do 6,776, a sumaryczny IF wynosi 35,166 (średnio 4,396 na artykuł). Wszystkie prace włączone w skład cyklu publikacji powstały we współpracy z prof. Stanisławem Lamperskim, a Pan dr Jacek Kłós jest autorem pierwszym w 7 pracach i autorem korespondencyjnym w 5 pracach. Udział procentowy własnego wkładu w powstanie publikacji Habilitant ocenił w zakresie od 70 do 90% (średnio ponad 80%). Podane procentowe udziały sugerują, że był on pomysłodawcą tematów oraz świadczy o jego wiodącej roli w ich powstaniu. Jednak deklarowane procentowe udziały Habilitanta są trudne do zweryfikowania z uwagi na brak ich potwierdzenia w zamieszczonym oświadczeniu współautora prac – prof. Lamparskiego. Oświadczenie drugiego współautora jedynie opisowo wskazuje na udostępnione mu oprogramowanie oraz modele, które poddawał modyfikacji w kolejnych etapach opisu podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda/sól stopiona. W związku z tym oczekiwałbym od Habilitanta, podczas posiedzenia komisji habilitacyjnej, bliższego określenia jaki pomysł i zakres prac wniósł np. do publikacji H1.

Przedstawione prace stanowią cykl, których wspólnym elementem jest próba teoretycznego opisu właściwości podwójnej warstwy elektrycznej i zjawisk zachodzących na granicy faz elektroda/sól stopiona. W tym celu Habilitant stosował symulacje komputerowe typu Monte Carlo dla zaproponowanego modelu podwójnej warstwy elektrycznej, który rozwijał stopniowo począwszy od prostego modelu (jony traktowane jako sztywne kule), poprzez rozbudowywanie go o różne średnice kationów i anionów, uzupełnienie o miękkie oddziaływania pomiędzy jonami oraz uwzględnienie polaryzowalności metalu elektrody. W tym podejściu do problematyki tworzenia się i badania podwójnej warstwy elektrycznej na elektrodzie zanurzonej w soli stopionej widać konsekwentne i przemyślane działanie nastawione na jak najbardziej rzeczywiste odwzorowanie, poprzez zaproponowany model, właściwości badanej granicy faz.

Jednym z istotnych problemów naukowych nie do końca poznanych i opisanych jest budowa i właściwości podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda/sól stopiona. Pan dr Jacek Kłós podjął się jej opisu poprzez stosunkowo prosty model uwzględniający sól typu 1:1 oraz jony jako sztywne kule o jednakowej średnicy i ładunku jednostkowym (praca H1). Elektrody stanowiły sztywne płaszczyzny. Przeprowadzone symulacje komputerowe pozwoliły wyznaczyć singletowe funkcje rozkładu kationów i anionów w funkcji odległości od powierzchni elektrody (dla różnych ładunków na powierzchni elektrody) oraz temperaturowe zależności średniego współczynnika aktywności soli i pojemności cieplnej. Na podstawie temperaturowych zależności wyznaczył temperaturę przejścia fazy krystalicznej w ciekłą dla badanej modelowej soli. Najważniejszym

jednak osiągnięciem na tym etapie badań było wyznaczenie krzywej pojemności różniczkowej w funkcji ładunku elektrody. Okazało się, że krzywa pojemności różniczkowej przyjmuje kształt paraboliczny z maksimum przy zerowym ładunku elektrody. Kształt krzywej wprawdzie nie był zgodny z teorią Gouya – Chapmana, ale Habilitant potwierdził jej poprawność porównując z krzywą uzyskaną dla zmodyfikowanej teorii Poissona – Boltzmanna, która uwzględniała objętość własną jonów oraz oddziaływania elektrostatyczne między jonami. Rozwinięciem modelu opisanego w pracy H1 było uwzględnienie różnej polaryzacji elektrody oraz indukowanych jonami z elektrolitu ładunków elektrycznych w elektrodzie (tzw. obrazów elektrycznych) (praca H8). Dzięki temu zabiegowi określił wpływ polaryzowalności elektrody metalicznej na pojemność całkową i różniczkową podwójnej warstwy elektrycznej w solach stopionych różniących się stężeniem oraz zbadał w jaki sposób uwzględnienie obrazów elektrycznych wpływa na położenie krzywych pojemności względem tych uzyskanych bez uwzględniania obrazów. Obserwowane rozbieżności w kształtach krzywych pojemności całkowej i różniczkowej dla obu analizowanych przypadków Habilitant wyjaśnił stosując analogię pojemności płasko równoległego kondensatora oraz uwzględniając neutralizację oddziaływań odpychających i przyciągających sąsiednich jonów z ich obrazami.

W kolejnym etapie rozwoju modelu z jonami jako sztywnymi kulami Pan dr Jacek Kłós uwzględnił różne średnice dla kationów i anionów soli (praca H2). Podobnie jak poprzednio wyznaczył temperaturę przemiany soli w stan stopiony i krzywą pojemności różniczkowej w funkcji ładunku elektrody. Otrzymany asymetryczny kształt krzywej pojemności różniczkowej (posiadającej dwa maksima) powiązał z różnicą średnic jonów oraz wykazał jakościową i ilościową zgodność z innymi wynikami symulacyjnymi oraz wynikami eksperymentalnymi otrzymanymi dla cieczy jonowych (np. chlorku 1-metylo-3-etyloimidazolu i chlorku 1-metylo-3-heksaimidazolu na elektrodzie z węgla szklanego).

Dalszy rozwój modelu opierał się na uwzględnieniu różnych ładunków jonów dodatnich i ujemnych tzn. kationy były jednododatnimi sztywnymi kulami a aniony dwuujemnymi przy zachowaniu jednakowej ich średnicy (praca H3). Podobnie jak poprzednio Habilitant wyznaczył temperaturę przejścia z fazy krystalicznej do ciekłej oraz zaobserwował ciekawe zjawisko nadmiernego ekranowania ładunku elektrody przeciwjonami skutkujące inwersją potencjału w warstwie dyfuzyjnej. Co więcej, asymetryczny kształt krzywej pojemności różniczkowej w funkcji ładunku elektrody powiązał z różnicami w ładunkach kationów i anionów. Stwierdził także, że przebieg krzywej ściśle koreluje się ze stężeniem soli i dla niskich stężeń obserwuje się krzywą z dwiema maksimami a dla wysokich tylko z jednym maksimum.

Bardzo interesującym podejściem niereprezentowanym wcześniej w literaturze przedmiotu była próba zastosowania bardziej rzeczywistego modelu do rozważań na temat podwójnej warstwy elektrycznej bazująca na wprowadzeniu do modelu oddziaływań odpychających pomiędzy jonami poprzez uwzględnienie w symulacjach Monte Carlo członu odpychań z równania Lennarda – Jonesa (praca H4). Jak uprzednio, w modelu uwzględniono sól typu 1:1 o jednakowej średnicy kationów i anionów. Podobnie jak we wcześniejszych symulacjach wyznaczono temperaturę topnienia soli oraz zależność pojemności różniczkowej od ładunku powierzchniowego elektrody. W zasadzie zaobserwowano krzywą typu parabolicznego, ale w porównaniu z modelem opisanym w pracy H1,

maksimum osiągało niższą wartość (co Habilitant powiązał z większą grubością podwójnej warstwy elektrycznej), a dla dużych wartości ładunku powierzchniowego (dodatniego lub ujemnego) obserwowano znacznie wyższe wartości pojemności różniczkowej. Różnice te Pan dr Jacek Kłos wyjaśnił różną strukturą naładowanych warstw, przy czym dla wzrastającego ładunku elektrody grubość podwójnej warstwy elektrycznej nie zmieniała się znacząco, ale znacznym zmianom ulegała gęstość ładunku.

Z ciekawym zadaniem badawczym zmierzył się Habilitant w pracy H5, w której podjął się próby określenia wpływu różnych typów oddziaływań bliskiego zasięgu na kształt krzywych rozkładu ładunku w podwójnej warstwie elektrycznej (a tym samym na kształt krzywych pojemności całkowitej), przy czym rozważał oddziaływania z modelu sztywnych kul (praca H1), modelu Lennarda – Jonesa ograniczony do członu odpychań (praca H4) oraz modelu Lennarda – Jonesa uwzględniającym pełne równanie. Dla tego ostatniego modelu wyznaczył krzywą pojemności całkowitej w funkcji ładunku elektrody, na której w przeciwieństwie do tych uzyskanych w poprzednich modelach obserwowano płytkie minimum. Aby wyjaśnić te różnice, zastosował tym razem zupełnie nowe podejście i podwójną warstwę elektryczną potraktował jako układ warstw (płytek zastępczych, jak w kondensatorze, połączonych szeregowo) oddalonych od elektrody na różne odległości i posiadających zgromadzony ładunek elektryczny. Zabieg ten pozwolił nie tylko wytłumaczyć jak różne typy oddziaływań bliskiego zasięgu wpływają na sposób kształtowania się podwójnej warstwy elektrycznej, ale także po raz pierwszy opisać ilościowo wpływ rozkładu ładunku na kształt krzywej pojemności.

Kolejne ewolucje rozważanego modelu, opisującego właściwości podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda/sól stopiona, uwzględniały oddziaływania miękkie pomiędzy jonami lub pomiędzy jonami a elektrodą w postaci potencjału Lennarda – Jonesa ograniczonego do członu odpychań (praca H6) oraz pełnego potencjału Lennarda – Jonesa (praca H7). To podejście pozwoliło rozszerzyć rozważania o różne materiały elektrodowe (grafit, Hg, Pb), przy czym model rozróżniał kationy i aniony, ale nie różnicował ich średnic (praca H6) lub przyjmował różne średnice dla kationów i anionów (praca H7). Jak poprzednio Habilitant wyznaczył temperaturę topnienia soli oraz krzywe pojemności różniczkowej dla elektrod zbudowanych z różnych materiałów. W każdym z przypadków analizowanych w pracy H6 obserwowano maksima na krzywej, przy czym najmniej symetryczną krzywą otrzymano dla grafitu. Gdy uwzględniono pełne równanie Lennarda – Jonesa w modelu (praca H7), dla grafitu otrzymano krzywą w formie odwróconej paraboli (forma litery U). Kształt krzywych Habilitant powiązał z grubością podwójnej warstwy elektrycznej. Na uwagę zasługuje fakt, że dla modelu uwzględniającego pełne równanie Lennarda – Jonesa, modelowe krzywe pojemności różniczkowej porównano z danymi doświadczalnymi uzyskanymi dla elektrody Au i stwierdzono pewne rozbieżności, które wytłumaczono powstawaniem wiązań chemicznych między kationami materiału elektrody a anionami soli stopionej. Zdaniem Pana dr. Jacka Kłosa proces ten zasadniczo wpływał na tworzenie się i właściwości (np. pojemność) podwójnej warstwy elektrycznej w stopionych solach. Jednym z najważniejszych osiągnięć Habilitanta, wynikającym z przeprowadzonych symulacji i porównań z danymi doświadczalnymi, jest zaproponowana nowa metoda wyznaczania pojemności podwójnej warstwy elektrycznej (w kierunku prostopadłym do powierzchni elektrody) w oparciu o eksperymentalne pomiary funkcji rozkładu jonów opisane w pracy H5.

Podsumowując tą część recenzji można stwierdzić, że wyniki zawarte w zbiorze publikacji, przedstawionym jako osiągnięcie habilitacyjne, stanowią znaczący wkład Habilitanta w rozwój elektrochemii, a w szczególności przyczyniły się do głębszego poznania procesów tworzenia się i właściwości podwójnej warstwy elektrycznej w solach stopionych. Przedstawione modele i ich stopniowe uzupełnienie o rzeczywiste zjawiska zachodzące na granicy faz są ciekawe koncepcyjnie i niewątpliwie wartościowe. Z uwagi na nowatorskie podejście, na szczególną uwagę zasługuje uwzględnienie w modelu podwójnej warstwy elektrycznej oddziaływań miękkich oraz potraktowanie jej jako układu szeregowo połączonych warstw zastępczych ze zgromadzonym ładunkiem elektrycznym. Wszystkie publikacje z cyklu habilitacyjnego ukazały się w renomowanych czasopismach zagranicznych i prezentują bardzo dobry poziom naukowy.

Ocena całości dorobku naukowego

Tematyka badawcza prezentowana przez Pana dr. Jacka Kłosa w publikacjach naukowych jest stosunkowo jednolita i dotyczy zasadniczo dwóch zagadnień: pierwsze będące podstawą osiągnięcia naukowego wniosku habilitacyjnego dotyczy modelowania komputerowego i określenia właściwości granicy faz elektroda/sól stopiona, a drugie poświęcone badaniom różnych właściwości glasonomerowych wypełnień dentystycznych będących mieszaniną drobno mielonego proszku ze szkła fluorowo – glinowo – krzemowego oraz polimerowego kwasu organicznego, najczęściej poli(kwasu akrylowego). Ta druga tematyka badawcza realizowana była we współpracy z prof. Beatą Czarnecką z Zakładu Biomateriałów i Stomatologii Doświadczalnej Uniwersytetu Medycznego im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu oraz prof. Johnem Nicholsonem z Uniwersytetu Queen Mary w Londynie i zaowocowała 7 wspólnymi publikacjami naukowymi opublikowanymi w czasopismach z listy JCR.

Całkowity dorobek naukowy dr Jacka Kłosa obejmuje 19 publikacji z listy JCR, oraz jeden rozdział w monografii opublikowanej w języku polskim. Po uzyskaniu stopnia doktora Habilitant opublikował 17 prac w czasopismach z bazy JCR. Wynik ten świadczy o umiarkowanej aktywności naukowej Habilitanta i pozostawia pewien niedosyt jeśli weźmie się pod uwagę okres czasu jaki upłynął od uzyskania stopnia doktora. Sumaryczny współczynnik oddziaływania wszystkich publikacji z bazy JCR wynosi 73,39 (na podstawie IF z roku 2022), co daje średni IF na jedną publikację około 3,86. Średnia wartość IF świadczy o tym, że prace te ukazały się w dobrych czasopismach naukowych. O znaczeniu w świecie nauki badań prowadzonych przez Habilitanta świadczy także liczba cytowań jego prac równa 133, a bez autocytowań 106 (według bazy Web of Science) oraz Indeks Hirscha równy 5. Przedstawione dane naukowo-metryczne dowodzą, że dorobek naukowy Pana dr. Jacka Kłosa jest wprawdzie ubogi biorąc pod uwagę liczbę opublikowanych artykułów, ale jest rozpoznawalny w świecie naukowym tym bardziej, że dyscyplina którą się zajmuje nie należy do tych charakteryzujących się dużą cytawalnością prac.

Wyniki badań naukowych prowadzonych przez Habilitanta prezentowane były jedynie na konferencjach krajowych w formie 1 komunikatu ustnego wygłoszonego w okresie po uzyskaniu doktoratu oraz 8 prezentacji posterowych (w tym 3 po doktoracie). Niestety nie prezentował wyników na konferencjach międzynarodowych, jak również nie wygłosił żadnego wykładu na zaproszenie. Jest to spory mankament, gdyż prezentowanie wyników i poddawanie ich dyskusji na

forum krajowym i zagranicznym jest niezwykle istotne dla przyszłego samodzielnego pracownika naukowego.

Dr Jacek Kłós brał udział jako wykonawca badań realizowanych w ramach krajowego projektu naukowego (projekt KBN), ale nie pełnił roli kierownika w żadnym projekcie, co może wskazywać na brak umiejętności lub zaangażowania w pozyskiwanie funduszy na badania naukowe. Zdobywanie środków finansowych na badania jest bardzo cenną umiejętnością w aspekcie tworzenia przyszłej grupy badawczej.

Habilitant prowadzi wieloletnią współpracę naukową z Zakładem Biomateriałów i Stomatologii Doświadczalnej Uniwersytetu Medycznego im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu, a efektem tej współpracy są wspólne publikacje naukowe. W tym Zakładzie także odbył w 2016 i 2021 r. dwa krótkoterminowe (miesięczne) staże naukowe. Pewien niedosyt pozostawia brak szerszej współpracy naukowej z innymi ośrodkami krajowymi lub zagranicznymi.

Podjął się roli recenzenta jedynie dwóch artykułów naukowych przesłanych do czasopism elektrochemicznych: Journal of Solid State Electrochemistry i Electrochimica Acta. Jest to nadzwyczaj skromne działanie na rzecz środowiska naukowego biorąc pod uwagę fakt wieloletniego funkcjonowania Habilitanta w świecie nauki.

Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej

W latach 2006 – 2019 dr Jacek Kłós prowadził regularną działalność dydaktyczną na swojej macierzystej uczelni w formie proseminariów, ćwiczeń laboratoryjnych i rachunkowych dla studentów studiów I i II stopnia na kierunku Chemia. Opracował także materiały dydaktyczne dla kursu Podstawy Chemii Fizycznej dla ćwiczenia laboratoryjnego pt. „Aktywności i stężenia jonów wodorowych”. Niestety nie pełnił roli opiekuna naukowego prac licencjackich i magisterskich, co jest dość zaskakującym faktem z uwagi na długi okres pracy na uczelni.

Brał udział w kilku konferencjach krajowych i międzynarodowych poświęconych tematyce kapitału intelektualnego przedsiębiorstw i innowacjom. Rezultatem tego jest współautorstwo kilku prac, które ukazały się w materiałach konferencyjnych. Ponadto jest współautorem dwóch prac poświęconych zarządzaniu bezpieczeństwem informacji, które ukazały się w czasopiśmie Problemy Jakości oraz w Zeszytach Naukowych Politechniki Poznańskiej.

Działalność organizacyjna dr Jacka Kłosa była raczej skromna i sprowadzała się głównie do pełnienia funkcji związanych z zwalczaniem pożarów i ewakuacją pracowników, reprezentowania zakładu w pracach Inspektoratu BHP oraz nadzoru nad funkcjonowaniem sprzętu komputerowego i strony internetowej ćwiczeń laboratoryjnych dla kursu Chemia Fizyczna. Niestety nie ma żadnych osiągnięć w działalności organizacyjnej poza macierzystym Wydziałem i Uczelnią.

Wniosek końcowy

Oceniając przedstawiony do recenzji zwarty cykl publikacji stanowiący podstawę postępowania habilitacyjnego Pana dr. Jacka Kłosa oraz pozostały jego dorobek naukowy po uzyskaniu stopnia doktora, stwierdzam, że stanowią one istotny i oryginalny wkład w rozwój

dziedziny nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne. Habilitant potwierdził swoje kompetencje naukowe publikując rezultaty swoich badań w czasopismach o międzynarodowym oddziaływaniu. Gorzej natomiast przedstawiają się inne przejawy działalności zawodowej Habilitanta, a zwłaszcza mała aktywność w prezentowaniu wyników swoich badań na forum międzynarodowym, brak współpracy międzynarodowej, brak doświadczenie w zdobywaniu funduszy na badania i brak opieki na studentami realizującymi prace licencjackie i magisterskie.

Pomimo wymienionych słabości stwierdzam, że zostały spełnione wytyczne i wymogi określone w art. 219 Ustawy „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” z dn. 20 lipca 2019 roku (Dziennik Ustaw z 2021, poz. 478 z późniejszymi zmianami) stawiane kandydatom do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego i wnioskuję do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemicznej Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu o dopuszczenie Pana dr. Jacka Kłosa do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.