



Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

Lublin, dn. 08.05.2023r.

RECENZJA

osiągnięć naukowo-badawczych **dr. Jacka Kłosa** ze szczególnym uwzględnieniem osiągnięcia naukowego opisanego w cyklu prac „**Właściwości podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda – stopiona sól**” stanowiących podstawę w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne

Podstawą recenzji dorobku naukowo-badawczego dr. Jacka Kłosa było pismo Przewodniczącego Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu prof. dr hab. Macieja Kubickiego informujące, że zgodnie z decyzją RDN z dnia 27 lutego 2023 roku oraz uchwałą nr 82/2022/23 z dnia 17 marca 2023 roku Rada Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu powołała mnie na recenzenta w komisji habilitacyjnej w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauki ścisłe i przyrodnicze w dyscyplinie nauki chemiczne wszczętym na wniosek dr. Jacka Kłosa.

Recenzja opracowana została na podstawie przesłanych mi materiałów, przygotowanych przez Kandydata do stopnia doktora habilitowanego, które zawierały: Wniosek do Rady Doskonałości Naukowej z dnia 15 grudnia 2022 roku o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego; Dane wnioskodawcy; Potwierdzoną kserokopię dyplomu doktorskiego Jacka Kłosa; Autoreferat z wykazem osiągnięć naukowo-badawczych wraz z określeniem wkładu Habilitanta w publikacje (H1-H8) wchodzące w skład głównego osiągnięcia naukowego; Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych Habilitanta stanowiący znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny; Oświadczenia współautora publikacji (H1-H8) określające





Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

indywidualny wkład w ich powstanie oraz kopie publikacji (H1-H8). Wszystkie wymienione dokumenty zostały przygotowane zarówno w języku polskim jak i angielskim.

Sylwetka dr Jacka Kłosa

Doktor Jacek Kłos jest absolwentem Wydziału Chemii Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu, w którym uzyskał w roku 1994 tytuł magistra chemii (praca magisterska pt. „Właściwości luminescencyjne akrydyny oraz wygaszanie jej fluorescencji przez organiczne związki siarki (II) w roztworach wodnych”; promotor: prof. dr hab. Bronisław Marciniak).

W 1999 roku rozpoczął studia doktoranckie na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, które to uwieńczone zostały obroną pracy doktorskiej zatytułowanej „Wyznaczanie parametrów molekularnych za pomocą analizy globalnej zaników fluorescencji” w 2004 roku. Promotorem pracy był prof. dr hab. Andrzej Molski.

W latach 2004 – 2009 dr Jacek Kłos był konsultantem w Wielkopolskim Instytucie Jakości, na stanowisku specjalisty ds. wdrażania modeli TQM. W latach 2006 – 2019 pracował na stanowisku adiunkta w Zakładzie Chemii Fizycznej, Wydziału Chemii, Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Od 2019 roku po dzień dzisiejszy pełni funkcję specjalisty w w/w Zakładzie.

Dorobek naukowy i działalność naukowa

Na całkowity dorobek publikacyjny dr. Jacka Kłosa składa się z 19 oryginalnych prac naukowych opublikowanych w czasopismach z listy Journal Citation Reports (JCR) o sumarycznym współczynniku oddziaływania (IF) zgodnie rokiem opublikowania prac 60,950, co daje średnią 3,208 na publikację. Większość prac, bo 17, ukazało się po





Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

doktoracie i 8 z nich Habilitant wskazuje jako swoje osiągnięcie naukowe w postępowaniu habilitacyjnym. Prace te były cytowane wg bazy Scopus z dnia 13 grudnia 2022 roku 107 razy bez autocytowań, indeks Hirscha 6. Ponadto Habilitant jest autorem rozdziału w monografii naukowej. Bezpośredni udział w prezentacji badań Autor zaznacza w 8 konferencjach. Pragnę podkreślić, że jest to bardzo skromny dorobek oparty głównie na prezentacjach posterowych. Zdecydowanie brakuje w nim aktywności konferencyjnej na arenie międzynarodowej. To też zapewne przełożyło się na znikomą ilość powierzonych recenzji publikacji w międzynarodowych czasopismach (2 recenzje).

Jak wynika z przedłożonej dokumentacji dr Jacek Kłós uczestniczył w realizacji grantu pt. "Spektroskopia fluorescencyjna pojedynczych cząsteczek" (KBN - Numer projektu: 4 T09A 132 24; 2003 – 2006) pełniąc funkcję wykonawcy.

Ważnym elementem rozwoju młodego pracownika nauki, poszerzającym zarówno jego wiedzę jak i umiejętności są staże w innych ośrodkach badawczych. Dr Jacek Kłós odbył 2 krótkoterminowe staże naukowo – badawcze w ośrodkach krajowych, które zaowocowały współpracą z prof. Beatą Czarnecką z Zakładu Biomateriałów i Stomatologii Doświadczalnej, Uniwersytetu Medycznego im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu (w Katedrze i Zakładzie Biomateriałów i Stomatologii Doświadczalnej Uniwersytetu Medycznego im K. Marcinkowskiego w dniach 11.07.2016 – 12.08.2016 oraz w Katedrze i Zakładzie Biomateriałów i Stomatologii Doświadczalnej Uniwersytetu Medycznego im K. Marcinkowskiego w dniach 05.07.2021 – 30.07.2021). Aktywność publikacyjna wskazuje na współpracę międzynarodową (prof. John Nicholson z Uniwersytetu Queen Mary w Londynie czy dr. G.I. Guerrero-Garcia). Zastanawia więc brak wyjazdów do zagranicznych ośrodków badawczych.

Podsumowując, dr Jacek Kłós przedstawił w swoim dorobku dość skromną – w porównaniu do innych obecnie wnioskujących o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego – liczbę





Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

publikacji. Habilitant publikuje jednak w dobrych czasopismach naukowych, zrobił znaczący postęp w obszarze jakości badań. Brakuje ponadto wystąpień konferencyjnych, aktywności na arenie międzynarodowej czy też realizowanych grantów szczególnie po doktoracie. Nie mniej jednak całkowity dorobek naukowy i działalność naukowa dr. Jacka Kłosa uzyskany po doktoracie spełnia wymagania stawiane Habilitantom i uzasadnia wystąpienie o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Cykl prac wchodzących w skład osiągnięcia naukowego „Właściwości podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda – stopiona sól”

Strona formalna

Podstawę wniosku o uzyskanie stopnia naukowego doktora habilitowanego stanowi zbliżony tematycznie cykl 8 prac dotyczących właściwości podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda – stopiona sól.

Prace te zostały opublikowane w latach 2008-2021 i wszystkie znajdują się w bazie Journal Citation Report. Sumaryczny IF z roku 2022 każdej z tych 8-u prac wynosi 35,166, średni 4,396. Prace te były cytowane bez autocytowań wg bazy Scopus z dnia 13 grudnia 2022 roku 107 razy.

Wszystkie prace wchodzące w cykl habilitacyjny są współautorskie (dwóch autorów), w 7 pracach dr Jacek Kłós jest pierwszym autorem, a w 5 prowadził korespondencję z redaktorami czasopism, co świadczy o wiodącym udziale habilitanta w zainicjowaniu tych prac i ich wykonaniu. Wiodący wkład dr. Jacka Kłosa w pracach stanowiących cykl rozprawy habilitacyjnej został potwierdzony załączonymi oświadczeniami jego samego oraz współautora tych prac.





Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

Analizując pod względem formalnym przedłożony do oceny jako osiągnięcie naukowo-badawcze dr. Jacka Kłosa cykl artykułów nie znajduję żadnych uchybień z punktu widzenia Ustawy.

Strona merytoryczna

Tematyka przedstawionej rozprawy habilitacyjnej jest zarówno ciekawa jak i wychodzi naprzeciw wyzwaniom stawianym zagadnieniom, którymi zajmuje się dr Kłós czyli problematyką stopionych soli w aspekcie tworzącej się podwójnej warstwy elektrycznej.

Badania zrealizowano za pomocą symulacji komputerowych typu Monte Carlo, które jako narzędzie badawcze usytuowane pomiędzy metodami eksperymentalnymi a teoretycznymi pozwoliło na modelowanie i zrozumienie zachodzących zjawisk.

Można stwierdzić, że podjęte przez Habilitanta badania z obszaru właściwości podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda – stopiona sól wpisują się w nurt aktualnych prac badawczych. Analizując rozwój tematyki naukowo-badawczej trzeba zauważyć jej wielowymiarowość i wydzielić kilka wątków naukowych:

- rozpoczęcie badań od najprostszego modelu tj. Restricted Primitive Model (RPM, jony traktowane jako sztywne kule o tej samej średnicy oraz sztywna, płaska elektroda), przez stopniowe jego komplikowanie i urealnianie: zastosowanie różnych średnic dla kationów i anionów, zastosowanie różnych ładunków dla kationów i anionów, wprowadzenie modelu uwzględniającego oddziaływania miękkie między jonami, jonami a elektrodą, przez zastosowanie równania Lennarda-Jonesa ograniczonego do członu odpychań, a następnie pełnego równania Lennarda-Jonesa oraz uwzględnienie polaryzowalności metalu elektrody przez zastosowanie różnych przenikalności elektrycznych dla elektrody i stopionej soli;





Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

- zastosowanie parametrów fizycznych odpowiadających rzeczywistym stopionym solom: gęstości – stężenia (przez współczynnik upakowania η), względnej przenikalności elektrycznej ϵ_r oraz szerokiego zakresu ujemnych i dodatnich ładunków na elektrodzie;
- badanie, przed właściwymi obliczeniami, dla danego zastosowanego modelu elektrolitu zakresu temperatur, dla którego następuje przejście fazowe (zmiana strukturalna) ciało stałe – ciecz tak by móc prowadzić obliczenia dla takich temperatur, gdy badany elektrolit znajduje się w stanie ciekłym;
- prowadzenie obliczeń dla bardzo dużej liczby konfiguracji, liczonych w setkach milionów albo nawet miliardach, by zapewnić dużą dokładność wyników;
- zbieranie podstawowych fizycznych i strukturalnych danych dla badanego układu takich jak: profile potencjału elektrostatycznego w funkcji odległości od elektrody oraz singletowe funkcje rozkładu jonów w funkcji odległości od elektrody oraz
- wyznaczanie wartości pojemności różniczkowej C_{diff} dla PWE, które mogły by być porównane z wartościami eksperymentalnymi w przypadku ich dostępności.

Do przeprowadzenia obliczeń symulacyjnych wykorzystano programy numeryczne opracowane przez prof. Stanisława Lamperskiego.

Wśród wielu ciekawych badań czy wyników naukowych zaprezentowanych w publikacjach [A1] – [A8] chciałabym wyróżnić (za Autorem) najważniejsze osiągnięcia przedłożonej pracy habilitacyjnej :

- zbadanie granicy faz elektroda – stopiona sól dla szerokiego zakresu modeli opisujących tę granicę: model RPM (w tym wariant z różnymi średnicami jonów oraz różnymi ładunkami jonów), model RPM z uwzględnieniem różnych polaryzowalności elektrody i elektrolitu, model Lennarda-Jonesa ograniczony do członu odpychań oraz pełnego modelu Lennarda-Jonesa. Uzyskanie dla tych modeli podstawowych danych fizykochemicznych takich, jak: singletowe funkcje rozkładu jonów, przebiegi profilu





Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

potencjału, przebiegi objętościowej gęstości ładunku oraz krzywe pojemności różniczkowej;

- określanie **po raz pierwszy** przed właściwymi obliczeniami temperatur przemian strukturalnych na podstawie wyznaczenia temperaturowej zależności pojemności cieplnej $CV(T)$ w stałej objętości oraz radialnych funkcji rozkładu dla jonów kation – kation;
- wyznaczenie **po raz pierwszy** dla układu elektroda – stopiona sól oraz modelu RPM, krzywej pojemności różniczkowej C_{diff} w funkcji ładunku elektrody σ . Odkryciem było, że krzywa posiada kształt dzwonu. Rezultat ten został potwierdzony obliczeniami teoretycznymi przy użyciu teorii MPB, choć dla mniejszego stężenia. We wszystkich przypadkach odkryciem było, że mają one kształt wypukły: kształt dzwonu, zniekształcony kształt dzwonu bądź zniekształcony kształt garbu wielbłąda. Rezultat ten był nieoczekiwany gdyż dotychczasowe wyniki uzyskiwane dla wodnych roztworów elektrolitów miały kształt wklęsły litery U;
- wyjaśnienie **po raz pierwszy** kształtu krzywych pojemności różniczkowej C_{diff} przez powiązanie tej wielkości z grubością PWE. W celu uzasadnienia takiego podejścia, **po raz pierwszy**, została zastosowana analogia z płasko równoległym kondensatorem, którego pojemność jest odwrotnie proporcjonalna do ich odległości $C \sim 1/lsep$. 33;
- zaproponowanie nowego modelu PWE w stopionych solach, przez potraktowanie PWE jako kondensatora o wielu okładkach połączonych szeregowo, ale nierównych ładunkach na nich zgromadzonych. Model ten został wykorzystany do przeanalizowania PWE w stopionej soli i powiązania kształtu krzywych pojemności C_{int} z zastosowanymi modelami opisującymi stopioną sól;
- porównanie symulacyjnych krzywych pojemności różniczkowej C_{diff} (uzyskanymi dla najbardziej realistycznego modelu stopionej soli, Lennarda-Jonesa) z krzywymi eksperymentalnymi uzyskanymi dla elektrody Au. W wyniku porównania stwierdzono,





Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

że prawdopodobnie oddziaływania chemiczne grają dużą rolę w tworzeniu się PWE i wpływają na wyniki pomiarów pojemności;

- idea nowej metody wyznaczania pojemności PWE w oparciu o eksperymentalne pomiary funkcji rozkładu jonów w kierunku prostopadłym do powierzchni elektrody.

Podsumowując stwierdzam, że przedstawiony do oceny cykl 8-u powiązanych tematycznie prac naukowych w mojej opinii stanowi wystarczający, w rozumieniu Ustawy, wkład dr. Jacka Kłosa w rozwój nauki związanej z szeroko pojętymi właściwościami podwójnej warstwy elektrycznej na granicy faz elektroda – stopiona sól, wymagany do przyznania stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauki ścisłe i przyrodnicze w dyscyplinie nauki chemiczne.

Działalność dydaktyczna, organizacyjna, popularyzatorska i inna

Dr Jacek Kłós jako pracownik dydaktyczny prowadził zajęcia w formie proseminariów, ćwiczeń laboratoryjnych i rachunkowych dla studentów studiów I i II stopnia. Jest także autorem i współautorem rozdziałów w zeszytach pokonferencyjnych dotyczących rozwoju przedsiębiorstw w aspekcie projakościowego doskonalenia i innowacyjności czy też skryptu ćwiczeń laboratoryjnych.

Do osiągnięć dydaktycznych, bardzo ważnych z punktu widzenia doktora habilitowanego, należy pełnienie funkcji promotora w pracach magisterskich czy pracach licencjackich. Niestety nie zauważa się pełnienia tych funkcji u dr. Jacka Kłosa.

W ramach działalności organizacyjnej dr Jacek Kłós pełni rolę osoby do wykonywania działań w zakresie zwalczania pożarów i ewakuacji pracowników (2015 – do teraz), reprezentuje Zakład Chemii Fizycznej w pracach Inspektoratu BHP (2013 – do teraz), nadzorował funkcjonowanie komputerów na sali laboratoryjnej Chemii Fizycznej (2012





Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska
Katedra Chemii Analitycznej
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Chemii
Pl. M. Curie – Skłodowskiej 3/518
20-031 Lublin
Tel. 81 537 56 27
agnieszka.nosal-wiercinska@mail.umcs.pl

- 2016) stworzył i utrzymuje stronę internetową Pracowni Laboratoryjnej Chemii Fizycznej.

Podsumowując, dorobek dydaktyczny, organizacyjny i popularyzatorski w stopniu minimalnym ale jednak wypełniają wymogi Ustawy dla osób ubiegających się o stopień naukowy doktora habilitowanego.

Podsumowanie

Na podstawie oceny dorobku oraz osiągnięć naukowych dr. Jacka Kłosa a także innych aspektów jego działalności wyrażone poprzez moje wcześniej oceny cząstkowe stwierdzam, że wniosek dr. Jacka Kłosa w stopniu wystarczającym spełnia kryteria zwyczajowe i wszystkie wymagania ustawowe stawiane rozprawom habilitacyjnym (art. 219 ust. 1 pkt 2 i 3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 ze zm.)

W związku z powyższym, wnoszę o dopuszczenie dr. Jacka Kłosa do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

Prof. dr hab. Agnieszka Nosal - Wiercińska

