

Uzasadnienie wniosku o nagrodę Prezesa Rady Ministrów za wyróżnioną rozprawę doktorską dr. inż. Piotra Aleksandra Guńki

Praca doktorska Piotra Guńki obroniona została z wyróżnieniem 29 stycznia 2016 roku na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej. Recenzentami rozprawy byli prof. dr hab. Maria Gdaniec z Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu i prof. dr hab. Krzysztof Woźniak z Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Praca dr. Guńki z krystalochemii obejmuje szeroko zakrojone badania strukturalne związków arsenu będące kontynuacją badań podjętych w pracy magisterskiej i jest zatytułowana "Structural studies of arsenic(III) oxide polymorphs and intercalates". Głównym celem badań prowadzonych przez Piotra Guńkę było określenie wpływu szeregu czynników na upakowanie i konformację cząsteczek As_2O_3 w fazach krystalicznych, w szczególności roli słabych wtórnych oddziaływań $\text{As}\cdots\text{O}$, wolnej pary elektronów walencyjnych arsenu oraz oddziaływań z jonami wprowadzonymi w struktury interkalatów. Obszar badań był bardzo rozległy i obejmował między innymi różne metody krystalizacji nieorganicznych związków arsenu, pomiary dyfrakcyjne monokryształów i próbek polikrystalicznych, obliczenia rozkładu gęstości elektronowej w oparciu o wysokorozdzielcze pomiary dyfrakcyjne, eksperymenty dyfrakcyjne monokryształów poddanych wysokiemu ciśnieniu (do 30 GPa), analizę struktur krystalicznych i map gęstości elektronowej oraz obliczenia kwantowo-mechaniczne dla faz stałych. Piotr Guńka opracował metody krystalizacji tlenku arsenu(III) pozwalające na kontrolowane otrzymywanie wszystkich odmian polimorficznych tego tlenku, dzięki czemu mógł dla nich przeprowadzić wysokociśnieniowe badania dyfrakcyjne. Jednym z ważniejszych osiągnięć było wykazanie, że kładetyt II jest fazą metastabilną i ulega odwracalnym przemianom polimorficznym pod zwiększonym ciśnieniem a następnie wyznaczenie struktur krystalicznych trzech nowych odmian wysokociśnieniowych As_2O_3 . Należy podkreślić, że wynik ten został przewidziany wcześniej na podstawie wykonanych przez Piotra Guńkę obliczeń DFT dla kryształów kładetytu I i II. Badania ciśnieniowe arsenolitu, regularnej odmiany As_2O_3 , przyniosły kolejne, niezwykle ważne odkrycie. Dzięki bardzo wnikliwej analizie szeregu obrazów dyfrakcyjnych Piotr Guńka wykazał, że hel stosowany jako czynnik przenoszący ciśnienie, przy ciśnieniach większych od 3 GPa wnika w strukturę nieporowatego kryształu arsenolitu tworząc fazę klatratu o stechiometrii $\text{As}_4\text{O}_6\cdot 2\text{He}$. Wykazanie, że hel pod ciśnieniem może wnikać w strukturę nieporowatych kryształów ma olbrzymie znaczenie dla interpretacji wyników badań ciśnieniowych innych substancji. Piotr Guńka, jako pierwszy, wyznaczył rozkład gęstości elektronowej w kryształach arsenolitu. Szczegółowa analiza otrzymanej mapy gęstości elektronowej z zastosowaniem teorii QTAİM wspartej analizą funkcji lokalizacji elektronów ELF pozwoliła mu na zaobserwowanie interesującego efektu rozproszenia wolnej pary elektronowej zlokalizowanej przy rdzeniu arsenu na trzy obszary znajdujące się w położeniach *trans* w stosunku do

wiązań As–O. Kolejnym osiągnięciem Piotra Guńki było otrzymanie i wyznaczenie struktury krystalicznej nowych związków interkalowanych As_2O_3 zawierających liniowe aniony azydkowe - $\text{NH}_4\text{N}_3 \cdot 2\text{As}_2\text{O}_3$ i $\text{KN}_3 \cdot 2\text{As}_2\text{O}_3$. Obliczenia DFT wykonane dla tych faz krystalicznych pozwoliły na wskazanie oddziaływań odpowiedzialnych za ich trwałość i zaproponowanie mechanizmu ich krystalizacji. Rozprawa doktorska oparta została na 5 publikacjach w renomowanych czasopismach naukowych z listy filadelfijskiej o sumarycznym współczynniku wpływu $\text{IF} = 23$. Warto tutaj przytoczyć opinię dr. hab. inż. Janusza Zachary, prof. PW, promotora opisywanej tu rozprawy, który podkreśla bardzo dużą aktywność Piotra Guńki w wyznaczaniu celów badawczych i świetnie opanowaną umiejętność przygotowywania publikacji naukowych. We wszystkich pięciu publikacjach dr Guńka jest pierwszym autorem oraz autorem korespondencyjnym. Ponadto w momencie obrony rozprawy był współautorem 7 innych publikacji, co było wynikiem Jego zaangażowania we współpracę naukową z innymi zespołami badawczymi. Obecnie Piotr Guńka jest współautorem kolejnych 3 publikacji.

Rozprawę doktorską Piotr Guńka obronił z wyróżnieniem 29 stycznia 2016 r. Zgodne opinie recenzentów wnioskujących o jej wyróżnienie świadczą o bardzo wysokim poziomie pracy doktorskiej, znacznie przewyższającym wymagania stawiane doktoratom. Pani prof. Gdaniec w swojej recenzji stwierdziła nawet, że w jej odczuciu osiągnięcia naukowe opisane w rozprawie mogłyby stanowić podstawę do wystąpienia o przyznanie stopnia doktora habilitowanego.

Należy zaznaczyć, że Piotr Guńka potrafi zadbać o uzyskanie finansowania badań o czym świadczy fakt, że był kierownikiem dwóch projektów finansowanych przez NCN ("Preludium") i MNiSW ("Iuventus Plus"), w ramach których wykonywane były badania będące podstawą jego rozprawy doktorskiej. Warto również nadmienić, że Piotr Guńka przygotował dobrze ocenione projekty badawcze, dzięki którym dwukrotnie otrzymał czas pomiarowy na synchrotronie Advanced Photon Source w Argonne National Laboratory w USA, a w roku 2014 prowadził badania w European Synchrotron Radiation Facility w Grenoble we Francji.

Podsumowując, Rada Wydziału Chemicznego stwierdza, że rozprawa doktorska dr. inż. Piotra Guńki jest pracą wybitną i wnioskuje o nagrodzenie jej nagrodą Prezesa Rady Ministrów w szczególności ze względu na opisane wyżej imponujące osiągnięcia naukowe, szeroki wachlarz zastosowanych technik badawczych w pracy oraz samodzielność w przygotowywaniu publikacji naukowych i wysoką aktywność w wyznaczaniu celów badawczych dr. Guńki.