



UNIwersytet
Warszawski



Warszawa, dn. 31.08.2022

**Ocena rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego
dr. inż. Piotra Aleksandra Guńki**

Ocena sporządzona jest w związku ze wnioskiem dr. inż. Piotra Aleksandra Guńki z dnia 15 lutego 2022r o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne skierowanego do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne Politechniki Warszawskiej za pośrednictwem Rady Doskonałości Naukowej oraz uchwałą Prezydium Rady Doskonałości Naukowej z dnia 30 maja 2022 i uchwałą 190/22/2022 Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne Politechniki Warszawskiej z dnia 21 czerwca 2022r zawierającą informację o powołaniu mnie na recenzenta. Na dokumentację składa się wniosek z dnia 15 lutego 2022r o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego, skan dyplomu doktora nauk chemicznych, autoreferat przedstawiający wskazanie osiągnięć naukowych, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce, omówienie osiągniętych wyników prac stanowiących jego podstawę (zawierający również dane personalne, wykaz posiadanych dyplomów oraz informację o dotychczasowym przebiegu zatrudnienia), ich wykaz wraz z określeniem zakresu wykonanych prac a także omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych w języku polskim oraz angielskim. Przedstawiony został również wykaz pozostałych opublikowanych prac naukowych, dane bibliometryczne, informacje o uzyskanych grantach naukowych oraz nagrodach i stypendiach, wykaz wykładów na zaproszenie i wystąpień konferencyjnych, informacja o osiągnięciach dydaktycznych i popularyzacji nauki jak również aktywności naukowej realizowanej w innych jednostkach naukowych, kopie 8 publikacji wchodzących w skład monotematycznego cyklu prac stanowiącego podstawę do wszczęcia procedury habilitacyjnej i oświadczenia autorów publikacji wchodzących w monotematyczny cykl będący podstawą do wszczęcia procedury.

Dane formalne

Pan dr inż. Piotr Aleksander Guńka w 2010 roku ukończył z wyróżnieniem *summa*

Prof. dr hab. Michał K. Cyrański
Pasteura 1
02-093 Warszawa
e-mail: mkc@chem.uw.edu.pl
Tel: 22 55 26 360

cum laude jednolite studia magisterskie na kierunku Technologia Chemiczna na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej broniąc pracę magisterską pt. „*Struktura supramolekularna oksoarsenianów(III) amoniowych*”. Po ukończeniu studiów wyższych podjął on studia doktoranckie w swojej *Alma Mater* (2010-2016). W tym czasie został zatrudniony w macierzystej jednostce na stanowisku asystenta naukowo-dydaktycznego (2012-2016). W 2016 obronił on z wyróżnieniem pracę doktorską pt. „*Structural Studies of Arsenic(III) Oxide Polymorphs and Intercalates*”. Obie prace (magisterska i doktorska) wykonane zostały pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Janusza Zachary. Od 2017 roku zatrudniony jest na etacie adiunkta badawczo-dydaktycznego w Politechnice Warszawskiej. W okresie przed obroną pracy doktorskiej odbył trzymiesięczny staż w Paul Scherrer Institut w Villigen (Szwajcaria, 2012, grupa prof. Kazimierza Condera), na który uzyskał stypendium National Centre for Competence in Research Materials with Novel Electronic Properties, natomiast po uzyskaniu stopnia doktora roczny staż podoktorski w Carnegie Institution for Science w Waszyngtonie, DC (USA, 2019/2020, grupa dr. Timothy’ego A. Strobel, Geophysical Laboratory), który sfinansowany został w ramach Programu im. Mieczysława Bekkera Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej. Dwukrotnie uczestniczył również w renomowanej szkole krystalograficznej w Erice na Sycylii (Włochy): „*High-pressure Crystallography. Status Artis and Emerging Opportunities*” (2016) oraz „*Quantum Crystallography*” (2018).

Rozprawa habilitacyjna dr. inż. Piotra Aleksandra Guńki poświęcona jest bardzo ważnym zagadnieniom z zakresu chemii strukturalnej i inżynierii krystalicznej, związanych z badaniem oddziaływań międzycząsteczkowych w warunkach wysokiego ciśnienia w układach w których obecność wolnych par elektronowych w znaczącym stopniu wpływa na strukturę krystaliczną oraz na zdolność do tworzenia różnego typu związków interkalacyjnych i inkluzyjnych. Badania te dotyczą modelowych związków organicznych - tlenku arsenu(III) i jego związków inkluzyjnych z wodorem i helem oraz związków interkalacyjnych z halogenkami metali alkalicznych, także urotropiny. Podejmowane problemy mają charakter badań podstawowych, jednak mogą mieć potencjalne przełożenie aplikacyjne ze względu na możliwość wykorzystania wyników badań dla projektowania nowych układów w zróżnicowanych warunkach fizykochemicznych. W mojej ocenie to perspektywiczna i interesująca tematyka badawcza.

Ocena dorobku naukowego

Pan dr inż. Piotr Aleksander Guńka opublikował łącznie 34 prac naukowych w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym z określonym współczynnikiem oddziaływania (IF). Poza jedną pracą (*Coord. Chem. Rev.* 2019) są to prace oryginalne. Wszystkie stanowią publikacje wieloautorskie. Liczba autorów prac wynosi od 2 do 14, przy czym najczęściej są to prace cztero- pięcio- i sześćoautorskie. Zdecydowana większość prac (24) ukazała się po uzyskaniu stopnia doktora, co uważam za wynik bardzo dobry. Pisma, w których ukazały

się prace należą do dobrych a nawet bardzo dobrych periodyków naukowych takich jak m.in. *Angewandte Chemie International Edition* (2 prace), *Journal of the American Chemical Society*, *Coordination Chemical Reviews*, *Science Advances*, *Chemical Communications*, *Acta Crystallographica B*, *Chemistry – a European Journal* (2 prace), *Dalton Transactions* (5 prac), *Crystal Growth & Design* (5 prac), czy *CrystEngComm* (2 prace). Sumaryczny *Impact Factor* opublikowanych prac zgodnie z rokiem opublikowania wynosi 187.6 (131.8 po uzyskaniu stopnia doktora), co stanowi średnio ok. 5.2 na pracę. Jest to wynik bardzo dobry. Habilitant nie ma żadnej publikacji monoautorskiej, na podkreślenie zasługuje jednak, iż w dużej części prac znajduje się on bardzo wysoko na liście autorów (w ok. połowie prac na pierwszej, drugiej lub ostatniej pozycji), co świadczy o tym, iż jego wkład jest dominujący. Prace Pana dr. inż. Piotra Aleksandra Guńki były cytowane łącznie 393 razy (357 bez autocytowań), zaś indeks Hirscha wynosi $H=12$. Jest to bardzo dobry wynik, który wskazuje z jednej strony na znaczący wpływ prac Habilitanta na rozwój nauki, z drugiej zaś na jego bardzo dużą aktywność oraz dobrze określone/zaplanowane etapy ścieżki rozwoju naukowego. Habilitant posiada 8 prac, które są cytowane ponad 20 razy, przy czym najlepiej jego cytowana praca (*Angew. Chem. Int. Ed.* 2017) ma 58 cytowań. Jest to bardzo dobry rezultat. Dr inż. Piotr Aleksander Guńka przedstawiał wyniki swoich badań w formie 48 wystąpień konferencyjnych (29 z nich osobiście) w tym 2 wykładów na zaproszenie na międzynarodowych warsztatach krystalografii wysokociśnieniowej *Frolic Goats* w Poznaniu (2015, 2020) oraz 8 komunikatów ustnych na konferencjach międzynarodowych. Te ostatnie zostały w zdecydowanej większości przedstawione po uzyskaniu przez niego stopnia doktora. Bardzo dużą aktywność Habilitant wykazywał na polu związanym ze zdobywaniem funduszy na badania naukowe w ramach otwartych konkursów. Jest on obecnie kierownikiem grantu NCN SONATA16 (2021-2024), zaś w przeszłości był kierownikiem grantów PRELUDIUM3 (2013-2016) i Iuventus Plus MNiSW (2013-2015) oraz dwóch grantów wewnętrznych na PW jak również wykonawcą trzech innych projektów badawczych (NCN OPUS14, 2020-2021; NCN OPUS11, 2017-2018; NCN OPUS1, 2013). Oprócz tego uzyskał finansowanie staży zagranicznych: doktorskiego (przez podmiot zagraniczny) oraz poddoktorskiego (przez NAWA). Za działalność naukową był nagradzany licznymi nagrodami i stypendiami. Były to m.in. Nagroda im. Janiny Janikowej PTCh za najlepszą pracę magisterską (2011), stypendium START FNP (2016), Nagroda im. Wojciecha Świątosławskiego III stopnia PTCh, trzykrotnie nagrody zespołowe JM Rektora Politechniki Warszawskiej I stopnia (2015, 2017, 2021). Na szczególne uznanie zasługuje złoty medal (za zajęcie 21 miejsca) na 38 Międzynarodowej Olimpiadzie Chemicznej w Korei (2006). Kończąc tę część oceny rozprawy warto zauważyć, że Habilitant był proszony o recenzowanie prac naukowych nadsyłanych do Edytorów ważnych czasopism z jego dziedziny – m.in. *Journal of Inorganic Biochemistry*, *Acta Crystallographica Section B*, *Synthetic Metals*, *Reviews in Inorganic Chemistry*, *Journal of Molecular Structure*, *Journal of Physical Chemistry C* czy *Applied Physics A*. Łącznie wykonanych recenzji było 14. Wskazuje to na uznanie jego kompetencji przez naukowe instytucje zewnętrzne.

W podsumowaniu tej części stwierdzam, iż zarówno całkowity dorobek publikacyjny Habilitanta jak i związana z nim aktywność naukowa jest na bardzo dobrym poziomie.

Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej

Tytuł osiągnięcia naukowego brzmi: „*Badania wysokociśnieniowych przemian fazowych i procesów interkalacji w wybranych związkach zawierających wolne pary elektronowe*”. Na rozprawę składa się cykl 8 monotematycznych publikacji naukowych opublikowanych w latach 2018-2022. Są to prace oryginalne, opublikowane w dobrych/bardzo dobrych czasopismach naukowych – dwie prace w *Crystal Growth & Design* (**H7**, **H8**, IF=4.1), po jednej pracy *Acta Crystallographica B* (**H3**, IF=6.7), *Chemistry – a European Journal* (**H6**, IF=5.2), *Journal of Physical Chemistry C* (**H2**, IF=4.3), *CrystEngComm* (**H5**, IF=3.5), *Journal of Chemical Physics* (**H4**, IF=3.0) oraz *ChemPhysChem* (**H1**, IF=2.95). Wszystkie publikacje są wieloautorskie a liczba współautorów waha się w granicach 2-7 (oszacowany wkład Habilitanta wynosi 30-70%). Współautorzy złożyli wyczerpujące oświadczenia, które są spójne z oszacowanym wkładem dr. Piotra Aleksandra Guńki i opisem zakresu jego prac. We wszystkich pracach Habilitant jest autorem korespondencyjnym; w sześciu z nich jest na pierwszej pozycji, w dwóch pozostałych na ostatniej. Wskazuje na jego dominujący wkład w powstanie tych publikacji. W jednej z prac (**H6**) drugim autorem korespondencyjnym, o równoważnym wkładzie, jest dr Kamil Dziubek. Jest to również odzwierciedlone w procentowym wkładzie Kandydata. Habilitant przedstawił również oświadczenia autorów innych publikacji autora niewchodzących w skład monotematycznego cyklu prac stanowiących podstawę habilitacji.

Przedstawione prace stanowią spójny cykl publikacji poświęconych zaawansowanym badaniom strukturalnym w zakresie tworzenia nowych układów zawierających wolne pary elektronowe i charakterystyki relacji strukturalnych w zróżnicowanych warunkach termodynamicznych. Przedmiotem badań był tlenek arsenu(III) i jego związki inkluzyjne z wodorem i helem jak również związki interkalacyjne z halogenkami metali alkalicznych. Badania rozszerzono o urotropinę. Praca **H1** poświęcona była określeniu mechanizmu wnikania helu w strukturę tlenku arsenu (III) pod zwiększonym ciśnieniem. Habilitant przeanalizował warunki tworzenia się inkluzatu, określił siłę napędową procesu tworzenia się $As_4O_6 \cdot 2He$ oraz przeanalizował zmiany strukturalne które towarzyszą i sprzyjają temu procesowi. Praca ta łączy aspekty eksperymentalne z obliczeniami teoretycznymi. Dzięki zastosowaniu podejścia SAPT Habilitant wykazał odpychający charakter oddziaływań $He \dots As_4O_6$ w warunkach przeprowadzonego eksperymentu, obalając wcześniejsze tezy literaturowe. Praca **H2** stanowi logiczne i bardzo interesujące rozwinięcie pracy **H1**. Poświęcona została wysokociśnieniowym badaniom oddziaływań tlenku arsenu (III) z cząsteczką wodoru. Włączenie obliczeń teoretycznych umożliwiło racjonalizację obserwowanego eksperymentalnie osłabienia wiązania H-H. Jego przyczyną było oddziaływanie z wolną parą elektronową arsenu i polaryzacja homordzeniowego wiązania. W pracy **H4** habilitant przebadął i w znacznym stopniu racjonalizował przyczyny rozszczepienia wibronu diwodoru w widmach ramanowskich As_4O_6

2H₂. W mojej ocenie to bardzo ważna analiza, wymagająca dalszych pogłębionych badań (są one w planach Kandydata). Praca **H5** poświęcona jest analizie strukturalnej kładetytu I, jednoskośnej warstwowej odmianie tlenku arsenu(III) pod ciśnieniami do 30 GPa. Kompleksowa analiza nie wykazała przejść fazowych w badanych warunkach termodynamicznych; umożliwiła jednak szczegółowy opis zależności strukturalnych w funkcji ciśnienia. Istotnym wnioskiem z pracy jest stwierdzenie, iż przebieg zmian długości pierwszorzędowych wiązań As–O i słabych oddziaływań As···O w funkcji ciśnienia jest analogiczny w przypadku wszystkich odmian As₂O₃, co świadczy to o takim samym charakterze tych oddziaływań we wszystkich formach tlenku arsenu(III). Ważnym wnioskiem z pracy **H3**, będącej ilościową analizą aktywności pary elektronowej arsenu(III) w tego typu układach, jest stwierdzenie, iż ciśnienie oraz aktywna strukturalnie para elektronowa są niezależnymi czynnikami powodującymi naprężenia w sferze koordynacyjnej arsenu. W mojej ocenie to bardzo ważna praca o dużym ładunku koncepcyjnym. Prace **H7** i **H8** poświęcone zostały syntezy i charakterystyce strukturalnej nowych interkalacyjnych tlenków arsenu(iii) z chlorkami potasu i rubidu. Są to bardzo dobre prace świadczące o biegłości metodologicznej i kreatywności Habilitanta. Swego rodzajem rozszerzenie analiz stanowi praca **H6**. Choć z punktu widzenia omawianych problemów wpisuje się w monotematyczny charakter cyklu prac (badania wysokociśnieniowe układów z wolnymi parami elektronowymi), w odróżnieniu do przedstawionych poprzednio poświęcona jest związkowi organicznemu, urotropinie. Najważniejszymi osiągnięciami było odkrycie i przebadanie wysokociśnieniowej, tetragonalnej odmiany polimorficznej oraz pionierskie zastosowanie metody udokładniania Hirshfelda (HAR) do wysokociśnieniowych danych rentgenowskich, co umożliwiło poprawny opis położenia wodoru. **Nie mam wątpliwości, iż problemy podjęte przez dr. inż. Piotra Aleksandra Guńkę są ważne, zaś przedstawione przez niego prace stanowią znaczący wkład w rozwój chemii strukturalnej. Są istotne z punktu widzenia poznawczego ale również mogą mieć przełożenie dla projektowania nowych układów o założonych właściwościach. W pracach tych Habilitant wykazuje się znajomością szerokiej gamy narzędzi badawczych zarówno eksperymentalnych jak i teoretycznych.** Biorąc pod uwagę dwa staże zagraniczne - staż doktorski w Paul Scherrer Institut w Villigen (Szwajcaria) oraz poddoktorski w Carnegie Institution for Science w Waszyngtonie, (USA), również współpracę naukową z dr. Michaeliem Hanflandem (Grenoble, Francja), prof. Andrzejem Katrusiakiem (Poznań, Polska), dr. Kamilem F. Dziubkiem (Sesto Fiorentino, Włochy), dr. Timothy A. Stroblem (Waszyngton, USA) dr. Michałem Hapką i prof. Grzegorzem Chałasińskim (Warszawa, Polska) i powstałe we współpracy publikacje naukowe, **warunek istotnej aktywności naukowej realizowanej w więcej niż jednej instytucji naukowej, zgodnie z art. 219 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce jest również wielokrotnie spełniony.**

Ocena działalności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzującej naukę

Równie bogata jak działalność naukowa jest działalność dydaktyczna i organizacyjna Habilitanta. Prowadził on szereg zajęć na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej

ramach laboratorium z: i) Laboratorium Chemii Nieorganicznej i Analitycznej dla kierunku Inżynieria Biomedyczna, I (2010-2014, 2017), ii) Chemii dla kierunku Technologia Chemiczna, Inżynieria Chemiczna, Inżynieria Materiałowa, I (2011-), Polymer Electrolytes w języku angielskim dla kierunku Materials for Energy Storage and Conversion, Erasmus Mundus, II (2011-2018) oraz ćwiczenia audytoryjne z i) Chemii Ogólnej i Nieorganicznej dla kierunku Biotechnologia, I (2011-2018), ii) Podstaw Krystalografii Rentgenowskiej dla kierunku Technologia Chemiczna, I (2011-), iii) Chemii Nieorganicznej dla kierunku Technologia Chemiczna, I (2017-) oraz iv) z Chemii dla kierunku Technologia Chemiczna I (2018-). Na podkreślenie zasługuje zróżnicowany charakter zajęć oraz ich zakres. Habilitant pełnił rolę kierownika czterech prac dyplomowych na stopień inżyniera (2018, 2018, 2021, 2022) i dwóch na stopień magistra (2018, 2021), oraz sprawował opiekę nad studentem biorącym udział w IV Ogólnopolskiej Olimpiadzie Krystalograficznej (student ten II zajął miejsce). W ramach działalności popularyzującej naukę m.in. wygłosił wykład pt. „Atom – budowa materii” na Uniwersytecie Trzeciego Wieku Politechniki Warszawskiej (2011r) a także prowadził zajęcia pt. „Akademia atomu” na Uniwersytecie Dzieci. Ponadto prowadził również indywidualne zajęcia laboratoryjne dla uczniów warszawskich szkół średnich (2015/2016 i 2016/2017) w ramach staży KNOW oraz zajęcia laboratoryjne w ramach Chemicznego Obozu Naukowego dla zdolnej młodzieży licealnej (2016). Wartym podkreślenia jest, iż Habilitant był również recenzentem zadań na Olimpiadę Chemiczną organizowaną przez Komitet Główny Olimpiady Chemicznej (przy Polskim Towarzystwie Chemicznym (2009-2014)) oraz tłumaczył treść zadań finałowych na język angielski. Dodatkowo uczestniczy w pracach w Kolegium Redakcyjnym przy Komitecie Głównym Olimpiady Chemicznej i układa zadania na Olimpiadę (2016r-). Od dwóch lat prowadzi również zajęcia z chemii ogólnej i nieorganicznej oraz krystalografii na kursie przygotowawczym do Międzynarodowej Olimpiady Chemicznej, która organizowana jest przez Komitet Główny Olimpiady Chemicznej. Aktywność ta wskazuje na ekspercki poziom wiedzy i umiejętności Kandydata w dyscyplinie chemia oraz w specjalności krystalografia. Zasługuje to na wielkie uznanie. Biorąc pod uwagę bardzo wysokie i niekwestionowane kompetencje Habilitanta należy wyrazić żal, iż do tej pory nie miał on możliwości pełnienia roli promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim lub postępowaniu prowadzącym do stopnia doktora oraz nie prowadził on wykładu monograficznego dla studentów. Oczywiście zależało to od różnych czynników, niekoniecznie będących w gestii Kandydata. Podsumowując: **działalność dydaktyczną organizacyjną oraz popularyzującą naukę oceniam jako zróżnicowaną a zarazem na jednoznacznie bardzo wysokim poziomie** Jestem pewien że przy potencjale, jaki reprezentuje, po uzyskaniu formalnej samodzielności naukowej będzie niezwykle cennym i kreatywnym członkiem społeczności naukowej swojej Jednostki Naukowej. Powinny być mu powierzane odpowiedzialne zadania służące Jej rozwojowi.

Konkluzja

Prace będące podstawą przewodu habilitacyjnego stanowią cykl monotematyczny. Stanowią znaczący wkład w rozwój chemii strukturalnej. Są istotne z punktu widzenia poznawczego ale również mogą mieć przełożenie dla projektowania nowych układów o założonych właściwościach. W badaniach Habilitant posługuje się nowoczesnymi narzędziami badawczymi. Na podstawie dostępnych dokumentów stwierdzam, iż przesłanki o których mowa w art. 219 z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce są spełnione: Habilitant posiada stopień doktora (ust. 1 pkt 1), posiada osiągnięcia naukowe, które stanowią znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne, na które składa się jednoznacznie określony indywidualny udział w ramach cyklu powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach naukowych, które w roku opublikowania artykułu w ostatecznej formie były ujęte w wykazie sporządzonym zgodnie z przepisami wydanymi na podstawie art. 267 ust. 2 pkt 2 lit. b (ust. 1 punkt 2b oraz ust. 2), wykazuje się istotną aktywnością naukową nie tylko w swojej macierzystej jednostce (Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej) ale również odbył 2 staże zagraniczne (doktorski w Szwajcarii oraz podoktorski USA) oraz ma dobrze rozwiniętą współpracę krajową i międzynarodową (ust. 1 pkt 3). Jego całkowity dorobek publikacyjny jak i związana z nim aktywność naukowa są na bardzo dobrym poziomie. Podobnie oceniam jego aktywność dydaktyczną i popularyzatorsko-organizacyjną. W związku z powyższym wnioskuję do Dyscypliny Nauki Chemiczne Politechniki Warszawskiej o nadanie dr. inż. Piotrowi Aleksandrowi Guńce stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.


Michał K. Cyrański