

Kraków, 30.08.2022



UNIwersytet  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

dr hab. Marlena Gryl  
Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej  
Zakład Krystalochemii i Krystalofizyki  
Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego  
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

## RECENZJA

**osiągnięcia habilitacyjnego, dorobku naukowego, organizacyjnego**

Wydział Chemii

**i dydaktycznego dr. inż. Piotra A. Guńki**

w związku z postępowaniem o nadanie stopnia naukowego

doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych,

w dyscyplinie nauki chemiczne

### Informacje ogólne

Podstawą wykonania niniejszej recenzji jest uchwała 190/22/2022 Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne Politechniki Warszawskiej z dnia 21.06.2022 roku powołująca mnie na recenzenta w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne, wszczętym na wniosek Pana dr inż. Piotra Aleksandra Guńki.

Otrzymałam dokumentację w przedmiotowej sprawie zawierającą: wniosek Habilitanta, autoreferat, wykaz osiągnięć naukowych, cykl 8 artykułów stanowiących osiągnięcie naukowe, stosowne oświadczenia współautorów publikacji oraz oświadczenia Habilitanta w związku z przyznanymi stażami naukowymi, nagrodami i wyróżnieniami.

### Sylwetka naukowa Habilitanta

Pan dr inż. P. A. Guńka uzyskał tytuł zawodowy magistra inżyniera technologii chemicznej na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej w 2010r. Jednolite studia magisterskie ukończył w ciągu 4 lat z wyróżnieniem. Otrzymał

ul. Gronostajowa 2

30-387 Kraków

tel. +48 12 686 26 00

fax +48 12 686 27 50

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

nagrodę im. Janiny Janikowej Polskiego Towarzystwa Chemicznego za najlepszą pracę magisterską w dziedzinie chemii. Następnie w latach 2010–2016 prowadził badania naukowe na studiach doktoranckich pod kierunkiem prof. dr hab. Janusza Zachary na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej. Tytuł naukowy doktora chemii uzyskał na macierzystej uczelni w 2016r. na podstawie rozprawy doktorskiej „Structural Studies of Arsenic(III) Oxide Polymorphs and Intercalates”, która została wyróżniona. W latach 2012–2017 był zatrudniony na pełnym etacie jako asystent naukowo–dydaktyczny, a następnie jako adiunkt badawczo–dydaktyczny na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej – do chwili obecnej.

#### **Podsumowanie dorobku naukowego**

Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych obejmuje 8 prac opublikowanych w latach 2018-2022, które składają się na osiągnięcie naukowe Pana dr inż. P. A. Guńki pt. ”Badania wysokociśnieniowych przemian fazowych i procesów interkalacji w wybranych związkach zawierających wolne pary elektronowe”.

We wszystkich pracach z tego cyklu był on autorem korespondencyjnym, a w sześciu z nich także pierwszym autorem. Wkład Habilitanta w powstanie każdej z tych prac był wiodący. Udział procentowy w powstaniu tych publikacji, oszacowany przez dr. inż. P. A. Guńkę, waha się w granicach od 30 do 70%. Takie przypisanie procentowe udziałów daje pozostałym autorom publikacji wkłady na poziomie 10%, przy założeniu równego rozkładu procentowego pozostałych udziałów. Współautorzy dołączyli także stosowne opisowe oświadczenia dokumentujące swój udział w powstaniu ww. publikacji. Wszystkie zaprezentowane prace są wieloautorskie. Trzy publikacje powstały bez udziału promotora pracy doktorskiej. Natomiast w dwóch publikacjach opisujących badania nad urotropiną pod zwiększonymi ciśnieniami oraz nową definicję liczby koordynacyjnej wskazano dwóch autorów korespondencyjnych. Sumaryczny impact factor (IF) 8 publikacji będących podstawą osiągnięcia, o którym mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2b Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, to 29,598. IF został wyliczony z danych dostępnych w Journal Citation Index, na podstawie roku opublikowania artykułu naukowego. Publikacje były sumarycznie cytowane 18 razy, w tym 11 razy bez autocytoowań. Stosunkowo niski indeks cytowań tych prac wynika z faktu, iż

zostały one opublikowane w latach 2018–2022. Sumaryczny IF według roku publikacji wszystkich prac wskazanych przez Autora rozprawy wynosi 188,038. Całkowita ilość cytowań 34 publikacji dr inż. P. A. Guńki dostępnych w Web of Science do momentu złożenia wniosku to 434, w tym 400 bez autocytowań autora, co daje indeks Hirscha 12 (z dnia 30.08.2022). Niewielkie różnice w podanych przez Habilitanta i recenzenta danych bibliometrycznych, w szczególności dotyczących liczby cytowań publikacji, wynikają z zastosowania różnych baz naukowych (Scopus i Web of Science) oraz innego terminu określenia tych parametrów.

### **Charakterystyka osiągnięcia i aktywności naukowej Habilitanta**

Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego koncentrują się wokół zagadnień syntezy oraz badań strukturalnych i spektroskopowych szeregu związków nieorganicznych pod wysokim ciśnieniem, zawierających arsen, w tym: badania związków inkluzyjnych arsenolitu, kładetytu I, oraz otrzymywanie i analiza struktury interkalatów tlenku arsenu(III). Do cyklu habilitacyjnego zostały także włączone prace dotyczące nowej odmiany polimorficznej urotropiny, otrzymanej w warunkach podwyższonego ciśnienia. Autor wskazał także na swój udział w tworzeniu nowej definicji liczby koordynacyjnej. Prace łączą się spójnie wokół zagadnień analizy oddziaływań niekowalencyjnych w ciele stałym, które są kluczowe do zrozumienia agregacji bloków budulcowych w strukturach krystalicznych.

Publikacja **H1** opisuje mechanizm i kinetykę wnikania helu w strukturę arsenolitu, czego rezultatem jest powstawanie związku inkluzyjnego  $As_4O_6 \cdot 2He$ . Autorzy pracy podejmują także próbę opisu natury oddziaływań atomów helu z tlenkiem arsenu(III) wykorzystując obliczenia kwantowo-mechaniczne.

Artykuły **H2** oraz **H4** dokonują charakterystyki związku inkluzyjnego arsenolitu z wodorem, otrzymanego pod zwiększonym ciśnieniem, o zaproponowanym składzie  $As_4O_6 \cdot 2H_2$ . Materiał ten został zaprojektowany przez autora w oparciu o otrzymany w publikacji **H1** związek inkluzyjny z He. Habilitant podjął się opisu struktury krystalicznej i oddziaływań międzycząsteczkowych wykorzystując metody XRD, obliczenia DFT oraz metody spektroskopowe (widma ramanowskie).

W pracy **H3** Habilitant wykorzystał nową definicję liczby koordynacyjnej, sformułowaną przez swojego promotora prof. J. Zacharę, w odniesieniu do uzyskanych związków tlenu arsenu(III) pod zwiększonym ciśnieniem.

Publikacja **H5** stanowi kontynuację podjętych podczas doktoratu badań nad odmianami polimorficznymi tlenku arsenu(III). W szczególności praca dotyczy badań strukturalnych kładetytu I pod zwiększonym ciśnieniem z wykorzystaniem danych synchrotronowych uzyskanych dla preparatu polikrystalicznego oraz dla monokryształu (w temperaturze pokojowej i w 10 K). Dzięki podjętym badaniom możliwe było porównanie charakteru oddziaływań As-O we wszystkich odmianach polimorficznych  $As_2O_3$ .

Artykuł **H6** dotyczy badań wysokociśnieniowej formy polimorficznej urotropiny. Habilitant wykorzystał badania strukturalne wspomagane obliczeniami DFT oraz badaniami spektroskopowymi w celu zrozumienia struktury odmiany polimorficznej  $\alpha$  pod zwiększonymi ciśnieniami i jej przemiany w tetragonalną formę wysokociśnieniową (ciśnienie ok. 14GPa). W publikacji Autor wykorzystuje metodę HAR (Hirshfeld Atom Refinement) na danych dyfrakcyjnych wysokociśnieniowych.

**H7** i **H8** opisują syntezę oraz badania strukturalne związków interkalacyjnych tlenku arsenu(III) z chlorkiem potasu oraz chlorkiem rubidu. W publikacjach dr inż. P. A. Guńka wykorzystuje obok analizy XRD także techniki spektroskopowe ( $^1H$  NMR,  $^{87}Rb$  NMR, IR) w celu zrozumienia organizacji bloków budulcowych w strukturach krystalicznych. Stabilność otrzymanych związków została oszacowana w oparciu o wyniki obliczeń DFT.

Jako najważniejsze swoje osiągnięcie Habilitant uważa odkrycie i charakterystykę związków inkluzyjnych arsenolitu z wodorem i helem,  $As_4O_6 \cdot 2H_2$  i  $As_4O_6 \cdot 2He$ , które ujął w opisie w takiej postaci: „Osiągnięcie to obejmuje otrzymanie tych substancji w formie czystej, opisanie mechanizmu i siły napędowej ich powstawania, częściowe wyjaśnienie przyczyny rozszczepiania wibronu wodoru na widmach ramanowskich związku  $As_4O_6 \cdot 2H_2$  oraz opis zmian konformacyjnych cząsteczek  $As_4O_6$  w inkluzacie helowym za pomocą współrzędnych symetrii”.

Do pozostałych osiągnięć Habilitanta można zaliczyć:

- analizę oddziaływań międzycząsteczkowych w związkach arsenu(III), także pod zwiększonym ciśnieniem;
- otrzymanie i badania nad wysokociśnieniową polimorficzną odmianą  $\beta$  urotropiny;
- wykorzystanie metody udokładniania HAR do wysokociśnieniowych danych rentgenowskich;
- syntezę i badania strukturalne nowych związków interkalacyjnych tlenku arsenu(III) z chlorkami potasu i rubidu.

Swoje badania dr inż. P. A. Guńka realizował systemowo, prowadząc obserwacje i weryfikując wyniki z literaturą przedmiotu. Nawiązał przy tym szeroką współpracę naukowo-badawczą ze specjalistami krajowymi i zagranicznymi. Od 2014r. pracował z dr. Michaeliem Hanflandem na synchrotronie ESRF w Grenoble we Francji, w tematyce związków inkluzyjnych arsenolitu z helem i wodorem, co zaowocowało opublikowaniem prac (nazewnictwo cytowane z autoreferatu Habilitanta): D1, D2, H1, H2 i H5. Ponadto w tym zakresie współpracował także z prof. Andrzejem Katrusiakiem z Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu (prace D1 i D2). Wspólne badania prowadził z dr. Kamilem F. Dziubkiem w dziedzinie wysokociśnieniowej chemii strukturalnej. Również z tej współpracy powstały publikacje (D1, D2 oraz H6). Po zakończeniu stażu doktorskiego kontynuował współpracę z dr. Timothyem A. Strobelem, specjalistą w dziedzinie badań spektroskopowych hydratów wodoru. Jej efektem są publikacje H4, PH1 i PH2. Taka wymiana doświadczeń jest bardzo korzystnym zjawiskiem z punktu widzenia rozwoju nauki.

**Uwagi recenzenta do autoreferatu i publikacji wchodzących w skład dorobku naukowego:**

Habilitant na wstępie swojego referatu wskazuje, że wykonane badania dotyczą zagadnień inżynierii krystalicznej. W autoreferacie zabrakło mi jednak wskazania jakie metody inżynierii krystalicznej zostały wykorzystane w projektowaniu nowych materiałów. Analiza oddziaływań międzycząsteczkowych w aspekcie inżynierii kryształów ma prowadzić do otrzymania materiałów funkcjonalnych do konkretnych zastosowań. Aspekt potencjalnych zastosowań otrzymanych związków chemicznych został w autoreferacie pominięty.

W publikacji H6 Autor wskazuje na obiecujące wyniki udokładniania wysokociśnieniowej struktury urotropiny z wykorzystaniem metody HAR. Uzyskane pozycje atomów wodoru zostały porównane z otrzymanymi na drodze obliczeń kwantowo-mechanicznych (DFT) oraz z danymi

neutronograficznymi. Na uwagę zasługuje fakt, iż jest to prawdopodobnie pierwsza publikacja wykorzystująca metodykę HAR do danych wysokociśnieniowych. Nie jest to jednak zaskakujące, ponieważ precyzyjne odtworzenie pozycji atomów wodoru i modelowanie ich czynników przemieszczeń wymaga wysokiej jakości, kompletnych danych dyfrakcyjnych, najlepiej z pomiarów wysokorozdzielczych, niskotemperaturowych. W literaturze naukowej odnajdziemy wszak obiecujące wyniki udokładniania metodą HAR z wykorzystaniem danych o niższej rozdzielczości (przynajmniej 0.8Å), ale cechujące się wysoką kompletnością. Zatem należy być bardzo ostrożnym, przy wyciąganiu ogólnych wniosków o możliwości stosowania tej metody do danych wysokociśnieniowych, zwłaszcza na podstawie jednego przypadku.

W publikacji **H1** Habilitant kwestionuje wyniki obliczeń metodą NCI dokonane przez konkurencyjną grupę badawczą (Sans *et al.*, Phys. Rev. B 2016, 93(5), 054102). Badania te wskazywały na istnienie stabilizujących oddziaływań pomiędzy tlenkiem arsenu a helem w strukturze związku inkluzyjnego  $\text{As}_4\text{O}_6 \cdot 2\text{He}$ . Zespół kierowany przez dr inż. P. A. Guńkę w **H1** postuluje odpychający charakter oddziaływania pomiędzy  $\text{He} \cdots \text{As}_4\text{O}_6$  na podstawie obliczeń SAPT. Pojawia się pytanie czy Habilitant brał pod uwagę zastosowanie jeszcze innych metod kwantyfikacji oddziaływań międzycząsteczkowych np. obliczenia QTAIM. Wielotorowe podejście umożliwiłoby jednoznaczne określenie charakteru oddziaływań międzycząsteczkowych w badanej strukturze krystalicznej.

Habilitant posiada w swoim dorobku współautorstwo 48 wystąpień konferencyjnych, gdzie w 29 z nich był autorem prezentującym. Natomiast 2 wykłady odbyły się na zaproszenie, wygłoszone na międzynarodowych warsztatach krystalografii w Poznaniu. Spośród konferencji naukowych na uwagę zasługuje uczestnictwo w konferencjach IUCr w Madrycie (2011), Montrealu (2014), Pradze (2021), a także w ECM w Warwick (2013), Rovinj (2015), oraz w szkołach krystalografii w Erice w (2016, 2018). Dr inż. P. A. Guńka był także uczestnikiem kursu the Higher European Research Course for Users of Large Experimental Systems -HERCULES 2013. Wykonał 14 recenzji publikacji dla czasopism naukowych takich jak: Journal of Inorganic Biochemistry (1), Acta Crystallographica Section B (1), Synthetic Metals (1), Open Chemistry (2), Crystals (2), Reviews in Inorganic Chemistry (1), Molecules (1), Applied Sciences (1), Journal of Molecular Structure (1), Minerals (1), Journal of Physical Chemistry C (1) i Applied Physics A (1). Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt

współpracy zagranicznej w postaci dwóch bardzo ważnych staży badawczych. Pierwszy z nich odbył przed uzyskaniem stopnia doktora w grupie prof. Kazimierza Condera w Paul Scherrer Institut w Villigen, w Szwajcarii od 1 lipca do 30 września 2012. Natomiast staż podoktorski, finansowany ze stypendium M. Bekkera, w grupie dr. Timothego A. Strobel w Earth & Planets Laboratory (wtedy Geophysical Laboratory), Carnegie Institution for Science, w Waszyngtonie, DC, w Stanach Zjednoczonych od 1 marca 2019 do 29 lutego 2020.

Dr inż. P. A. Guńka jest beneficjentem środków finansowych, przyznanych na badania naukowe. Aktualnie prowadzi badania jako kierownik projektu NCN Sonata 16 oraz wykonawca w granicie NCN Opus 14. Dotychczas był także kierownikiem Projektu Preludium 3 (2013-2016), kierownikiem Juventus Plus (2013-2015), wykonawcą w NCN Opus 11 (2017-2018), wykonawcą w NCN Opus 1 (2013). Kierował także dwoma grantami na Politechnice Warszawskiej: grantem wewnętrznym NCHEM.1 (2020-2021) oraz grantem dziekańskim habilitacyjnym (2017-2018).

#### **Aktywność dydaktyczna, organizacyjna i popularyzująca naukę**

Pan dr inż. P. A. Guńka prowadzi zajęcia dydaktyczne dla studentów na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej, głównie w obszarze chemii ogólnej i nieorganicznej oraz krystalografii, przeważnie w języku polskim, a także jeden przedmiot w języku angielskim. Poza tym pełnił rolę kierownika czterech prac dyplomowych na stopień inżyniera i dwóch na stopień magistra. Oprócz tych obowiązków Habilitant wykazał się dodatkową aktywnością dydaktyczną, organizatorską i popularyzującą naukę. Angażował się w wiele przedsięwzięć, nie tylko w środowisku akademickim, ale działał także na rzecz szerszego grona: młodzieży szkolnej, dzieci i osób starszych. Prowadził między innymi wykłady na Uniwersytecie Trzeciego Wieku Politechniki Warszawskiej, zajęcia na Uniwersytecie Dzieci, a także indywidualne zajęcia laboratoryjne dla uczniów warszawskich szkół średnich oraz zajęcia laboratoryjne na Chemicznym Obozie Naukowym dla uzdolnionej młodzieży licealnej. W ramach wolontariatu był opiekunem studenta prowadzącego badania laboratoryjne.

Pan dr inż. P.A Guńka był także członkiem komisji uczelnianych, jak również recenzentem na olimpiadach chemicznych, tłumaczem finałowych zadań laboratoryjnych na język angielski oraz redaktorem zadań na olimpiady chemiczne. Ponadto pracuje w Kolegium Redakcyjnym przy Komitecie Głównym Olimpiady Chemicznej. Prowadzi zajęcia z chemii ogólnej i nieorganicznej oraz

krystalografii na kursie przygotowawczym do Międzynarodowej Olimpiady Chemicznej. Jest ekspertem Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej, który może oceniać wnioski naukowców w programach wspierających mobilność krótkookresową. Ponadto jest Członkiem Polskiego Towarzystwa Chemicznego od 2010 r.

Wspomnieć należy, że Habilitant otrzymał liczne nagrody, stypendia i wyróżnienia. Były to trzykrotnie przyznane nagrody zespołowe I stopnia Rektora Politechniki Warszawskiej za osiągnięcia naukowe. Nagroda dla młodych naukowców, przyznana przez Warszawski Oddział Towarzystwa Chemicznego. Pan P. A. Guńka zdobył złoty medal olimpijski na 38 Międzynarodowej Olimpiadzie Chemicznej w Korei Południowej. Wśród przyznanych stypendiów otrzymał kolejno: na staż badawczy w Szwajcarii od National Centre for Competence in Research, dla młodych naukowców „Start”- Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej, a także stypendium Ministra Szkolnictwa Wyższego i Nauki. Następnie wyróżnienia za pracę magisterską oraz rozprawę doktorską. Także w szkole średniej otrzymywał kilkakrotnie stypendia za doskonałe wyniki w nauce. Były to dwukrotnie stypendia Ministra Edukacji oraz Stypendium Prezesa Rady Ministrów.

#### **Wnioski końcowe**

Pan dr inż. P. A. Guńka wykazuje się istotną aktywnością naukową, w tym także poza jednostką macierzystą. Wskazują na to liczne artykuły naukowe, wyrażające się w liczbie 34 (do złożenia przedmiotowego wniosku), opublikowane w czasopismach o zasięgu międzynarodowym, które powstały w ramach współpracy z zespołami badawczymi z ośrodków krajowych oraz międzynarodowych. Staże naukowo-badawcze w Szwajcarii oraz USA pozwoliły Habilitantowi na zdobywanie wiedzy i doświadczenia w zagranicznych uczelniach oraz nawiązanie współpracy, której efektem były zaawansowane badania naukowe i wspólne publikacje. Dr inż. P. A. Guńka recenzował artykuły naukowe dla międzynarodowych czasopism, co świadczy o uznaniu dla Jego osiągnięć i dorobku w świecie nauki. Brał udział w wielu konferencjach, zarówno krajowych, jak i międzynarodowych, które pozwalały na prezentowanie dokonań, wymianę doświadczeń i poszerzanie współpracy. Wykazał się skutecznością w finansowaniu swoich badań naukowych, jako kierownik i wykonawca licznych projektów badawczych.





Cykl artykułów, stanowiący osiągnięcie habilitacyjne o tytule „Badania wysokociśnieniowych przemian fazowych i procesów interkalacji w wybranych związkach zawierających wolne pary elektronowe” posiada znaczącą wartość naukową i wnosi wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne. Podkreślić tutaj należy dominujący wkład Habilitanta w ich powstanie. To świadczy o Jego szerokiej wiedzy tematycznej, zarówno teoretycznej, jak i praktycznej oraz samodzielności naukowej.

Dr inż. P. A. Guńka wykazuje się także istotną aktywnością dydaktyczną, organizatorską i popularyzatorską na rzecz uczelni, studentów, młodzieży szkolnej oraz społeczeństwa. Świadczą o tym liczne wykłady i prezentacje, zaangażowanie w przygotowywanie studentów i uczniów do olimpiad, prowadzenie zajęć dla uzdolnionej młodzieży, pomoc w badaniach laboratoryjnych, przynależność do różnych instytucji i organizacji oraz aktywny udział w ich działalności. Habilitant jest laureatem wielu nagród i wyróżnień, począwszy od szkoły średniej, co świadczy o uzdolnieniach i pasji do nauki.

Na podstawie przedstawionych mi do oceny dokumentów, uważam, że Pan dr inż. P. A. Guńka spełnia wymagania stawiane kandydatom w postępowaniu habilitacyjnym, zgodnie z art. 219 Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018r. (Dz.U. z 2022 r., poz. 574 z późn.zm.). Habilitant posiada stopień naukowy doktora nauk chemicznych, wykazuje się istotną aktywnością naukową, realizowaną w więcej niż jednej uczelni oraz posiada w dorobku osiągnięcia naukowe, stanowiące znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne, w tym jeden cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, opublikowanych w czasopismach naukowych, przy czym osiągnięcie to stanowi część pracy zbiorowej, w której opracowanie wydzielonego zagadnienia jest indywidualnym wkładem Habilitanta.

W związku z powyższym popieram nadanie Panu dr inż. P. A. Guńce stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.

