



dr hab. Liliana Dobrzańska, prof. UMK  
Wydział Chemii UMK  
ul. Gagarina 7  
87-100 Toruń  
E-mail: liliana.dobrzanska@umk.pl

dnia 16.08.2022

**Opinia na temat osiągnięć naukowych dr inż. Piotra Aleksandra Guńki w ramach postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych (dyscyplina - nauki chemiczne)**

**I. Zarys sylwetki Habilitanta**

Dr inż. Piotr Aleksander Guńka pasjonował się chemią już przed rozpoczęciem studiów na tym kierunku, co pozwoliło mu na dwukrotne uzyskanie tytułu laureata krajowej olimpiady chemicznej (2005, 2006), a w roku 2006 także złotego medalu na 38 Międzynarodowej Olimpiadzie Chemicznej w Korei Południowej. W roku 2010 po 4 latach nauki zakończył on jednolite studia magisterskie na kierunku Technologia Chemiczna Wydziału Chemicznego Politechniki Warszawskiej uzyskując tytuł magistra inżyniera technologii chemicznej. Jego praca magisterska zatytułowana 'Struktura supramolekularna oksoarsenianów(III) amoniowych' została wybrana i nagrodzona przez Polskie Towarzystwo Chemiczne jako najlepsza praca magisterska (2011). Podczas studiów magisterskich dr inż. P. A. Guńka uzyskał stypendium MNiSW za osiągnięcia w nauce (2009/2010). W roku 2010 podjął on studia doktoranckie na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej w trakcie których został zatrudniony na etacie asystenta naukowo-dydaktycznego (lata 2012-2017), a które zakończył w roku 2016 uzyskując stopień naukowy doktora w dziedzinie nauk chemicznych (dyscyplina-chemia). Przygotowany przez niego jednotematyczny cykl artykułów 'Structural studies of arsenic(III) oxide polymorphs and intercalates' będący podstawą do uzyskania stopnia doktora został wyróżniony. W czasie studiów doktoranckich Habilitant uzyskał dwukrotnie nagrodę zespołową Rektora Politechniki Warszawskiej I stopnia za osiągnięcia naukowe (2013/2014, 2015/2016). W latach 2013-2016 był kierownikiem dwóch projektów: projektu finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego Iuventus Plus „Analiza oddziaływań międzycząsteczkowych w odmianach polimorficznych i związkach interkalowanych tlenku arsenu(III)” oraz finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki (NCN), a realizowanego w ramach konkursu PRELUDIUM 3 „Charakteryzacja odmian polimorficznych i związków interkalowanych tlenku arsenu(III)”. Rok 2016 to nie tylko rok zakończenia studiów doktoranckich przez Habilitanta, ale i uzyskania nagrody III-stopnia im. Wojciecha Świątosławskiego przyznanej przez PTCh, oraz stypendium dla młodych uczonych 'Start' z



Fundacji Nauki Polskiej. W roku 2017 dr inż. Guńka został zatrudniony na stanowisku adiunkta naukowo-dydaktycznego na którym to stanowisku pozostaje do chwili obecnej. W tym też roku uzyskał habilitacyjny grant dziekański (2017-2018) z Politechniki Warszawskiej na projekt zatytułowany: „Badania strukturalne tlenku arsenu(III) pod zwiększonym ciśnieniem”. W roku 2021 uzyskał nagrodę zespołową Rektora Politechniki Warszawskiej (I stopnia) za osiągnięcia naukowe w latach 2019-2020 oraz grant wewnętrzny (2020-2021) w dyscyplinie nauki chemiczne NCHEM.1 na projekt zatytułowany „Badania strukturalne związków tlenowych arsenu i antymonu z wolną parą elektronową”. Obecnie jest kierownikiem projektu finansowanego przez NCN SONATA „Ste-rActLEP – badania strukturalne związków arsenu i antymonu zawierających aktywne strukturalnie wolne pary elektronowe”, którego realizacja obejmuje lata 2021-2024. W lutym tego roku dr inż. P. A. Guńka złożył wniosek o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego wraz z wymaganymi załącznikami.

## **II. Dorobek naukowy, aktywność naukowa oraz dane bibliometryczne**

Dorobek naukowy dr inż. Guńki obejmował na czas złożenia dokumentacji o wszczęcie postępowania habilitacyjnego 34 publikacje w czasopismach z listy filadelfijskiej z czego 12 prac zostało opublikowanych przed, a 22 po uzyskaniu stopnia naukowego doktora w dziedzinie nauk chemicznych (rok 2016). Ponadto był on współautorem 48 wystąpień konferencyjnych z których 29 zaprezentował samodzielnie (w tym 2 wykłady na zaproszenie, które wygłosił na międzynarodowych warsztatach krystalografii wysokociśnieniowej Frolic Goats w Poznaniu oraz 8 prezentacji ustnych). Dr inż. P. A. Guńka odbył dwa zagraniczne staże badawcze: 3-miesięczny przed uzyskaniem stopnia doktora w grupie prof. Kazimierza Condera w Paul Scherrer Institut w Villigen (Szwajcaria) oraz roczny staż podoktorski w grupie dr. Timothy A. Strobel w Earth & Planets Laboratory, Carnegie Institution for Science, w Waszyngtonie (USA) uzyskując stypendium na ten wyjazd w konkursie Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej w ramach programu im. Mieczysława Bekkera.

Dr inż. Guńka współpracuje aktywnie naukowo z badaczami polskimi i zagranicznymi wypełniając w ten sposób jeden z 3 warunków niezbędnych dla uzyskania stopnia doktora habilitowanego. W 2014 roku nawiązał współpracę z dr Michaelem Hanflandem pracującym na synchrotronie ESRF w Grenoble, we Francji, a dotyczącą tworzenia związków inkluzyjnych arsenolitu, jednej z polimorficznych odmian tlenku arsenu(III), z helem i wodorem, co zaowocowało opublikowaniem pięciu wspólnych prac - dwóch w ramach prowadzonych badań w trakcie studiów doktoranckich oraz trzech prac w ramach przedstawionego cyklu habilitacyjnego **H1**, **H2** i **H5**. Habilitant współpracuje także z Prof. Andrzejem Katrusiakiem specjalizującym się w pomiarach wysokociśnieniowych z Wydziału Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, którego wkład pojawił się w dwóch pracach złożonych w ramach postępowania o nadanie stopnia naukowego doktora oraz z dr Kamilem F. Dziubkiem z którym opublikował dwie prace podczas studiów doktoranckich oraz jedną w ramach przedstawionego tu cyklu prac stanowiących odniesienie dla wskazanych osiągnięć naukowych. Habilitant podtrzymuje też współpracę z dr Strobel, która wniosła do jego dorobku prace w tak prestiżowych czasopismach jak *Angewandte Chemie* (IF/5 = 15.3) czy *Science Advances* (IF/5 = 16.9).



Całkowita liczba cytowań prac Habilitanta na dzień 1.02.2022 (wniosek został złożony dnia 15.02. 2022) to 393 (357 bez autocytowań), a indeks Hirscha 12 (według bazy Scopus). Dla porównania całkowita liczba cytowań to 434 (396 bez autocytowań) i indeks Hirscha 13 na dzień 16.08 według Web of Science. Parametry te dobrze odzwierciedlają wysoką aktywność naukową kandydata, w stosunkowo krótkim okresie prowadzenia przez niego prac badawczych.

### III. Ocena przedłożonego osiągnięcia naukowego

Zainteresowania dr inż. P. A. Guńki od czasów rozpoczęcia systematycznych prac badawczych, czyli okresu przygotowywania pracy magisterskiej związane są z krystalografią, a w szczególności z chemią strukturalną tlenków arsenu. Przedłożony cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych pod tytułem „*Badania wysokociśnieniowych przemian fazowych i procesów interkalacji w wybranych związkach zawierających wolne pary elektronowe*” jest rozszerzeniem prac badawczych, które Habilitant prowadził wcześniej i bazuje w dużej mierze na spostrzeżeniach poczynionych podczas interpretacji wyników wysokociśnieniowych pomiarów dyfrakcyjnych prowadzonych na różnych odmianach polimorficznych tlenku arsenu(III) w trakcie studiów doktoranckich.

Badania kryształów pod zwiększonym ciśnieniem, mimo że prowadzone są od przeszło 50 lat ze względu na ulepszoną metodologię wykonywania pomiarów są jednym z cieszących się obecnie dużym zainteresowaniem trendów w chemii strukturalnej, umożliwiając poznanie zachowania materii w szczególnych warunkach. W skład przedstawionego jako osiągnięcie naukowe cyklu artykułów wchodzi 8 wieloautorskich prac (od 1 do 6 współautorów) opublikowanych w latach 2018-2022 w czasopismach o zróżnicowanym współczynniku oddziaływania od 2.9 do 5.2 takich jak przykładowo CrystEngComm czy Crystal Growth & Design (współczynnik oddziaływania czasopisma *Acta Crystallographica Section B* w 2019 roku wynosił 2.048 a nie jak podano 6.7 – był to IF za rok 2018, kiedy to niejako sztucznie przez wielokrotne cytowania jednej pracy wskaźnik ten uległ zawyżeniu, przy czym trzeba przyznać że mimo niewysokiego IF czasopismo to cieszy się dobrą opinią wśród krystalografów).

We wszystkich publikacjach dr inż. P. A. Guńka jest autorem korespondencyjnym, a w 6 z tych prac jest też pierwszym autorem. Prace **H1-H8** były cytowane 16 razy (10 bez autocytowań), a ich sumaryczny podany przez Habilitanta współczynnik oddziaływania to 33.938 (po skorygowaniu IF Act Cryst. B, 29.3), przy zsumowanej punktacji ówczesnego MEiN równej 920 (dane na dzień 1.02.2022 wg bazy Scopus; dla porównania całkowita liczba cytowań prac z przedstawionego cyklu na dzień 16.08.2022 to 18 wg Web of Science).

Wszystkie prace z wyjątkiem **H3** są pracami eksperymentalnymi w tym publikacje **H1, H2, H4, H5, H7, H8** są kontynuacją podjętych przed Habilitanta wcześniejszych badań i dotyczą różnorodności strukturalnej tlenowych związków arsenu. Praca **H6** odbiega tematycznie od tej serii, ale została włączona do niej przez analogię strukturalną - urotropina, jest w budowie podobna do arsenolitu, którego dotyczą wyniki badań przedstawione w pracach **H1, H2** oraz **H4**. Te trzy prace zainicjowane zostały wcześniej uzyskanymi wynikami wysokociśnieniowych pomiarów dyfrakcyjnych, których wyniki zostały włączone do cyklu prac



dla uzyskania stopnia doktora. Wówczas to Habilitant postawił hipotezę, że podczas tego typu badań prowadzonych w przenoszącym ciśnienie medium jakim jest hel, gaz ten wnika w drobne luki obecne w strukturze tego nieporowatego związku. Podana hipoteza została poparta obliczeniami metodą DFT. W dalszych swoich badaniach, których wyniki przedłożono w cyklu 8 prac prezentowanego osiągnięcia naukowego Habilitant starał się m.in. odkryć mechanizm wnikania helu w nieporowatą strukturę związku. Ze względu na ograniczony czas pomiarowy na synchrotronie badania te zostały przeprowadzone we współpracy z opiekunem linii pomiarów wysokociśnieniowych dr Hanflandem, który zebrał niezbędne dane pomiarowe. Wyniki te zostały zawarte w pracy **H1** w której to Habilitant zaproponował współistnienie dwóch mechanizmów dyfuzji helu: wolnej i szybkiej uzależnionych od jakości kryształu oraz oszacował czas całkowitego wysycenia gazem kryształu. Nasuwa się tu pytanie w jaki sposób wielkość badanego kryształu rzutuje na czas tej dyfuzji? Czy można określić okres czasu pełnego wysycenia bazując na ograniczonym materiale eksperymentalnym? W pracy **H1** przedstawione zostały również wyniki obliczeń kwantowo-mechanicznych wykluczające tworzenie zlokalizowanego wiązania między helem i arsenem, które było proponowane wcześniej przez grupę badawczą z Hiszpanii.

Wyniki zawarte w **H2** są kontynuacją badań wysokociśnieniowych tego samego związku tym razem przy zastosowaniu jako medium pomiarowego wodoru. Część eksperymentalna została przeprowadzona jak i wcześniej przez dr Hanflanda, który dodatkowo przeprowadził badania z zastosowaniem metody spektroskopii ramanowskiej potwierdzające obecność wodoru w uzyskanym związku. By uzyskać więcej informacji na temat oddziaływań między badanym materiałem i gazem Habilitant udał się na roczny staż do Carnegie Institution for Science (Waszyngton, USA), gdzie pod kierownictwem dr T. A. Strobelo specjalizującego się w spektroskopowych badaniach hydratów wodoru prowadził proskowe wysokociśnieniowe badania przy użyciu spektroskopii ramanowskiej stosując izotopy wodoru tj. prot i deuter w szerokim zakresie temperatur, których wyniki opisał w **H4**. W tym też artykule (2020) pojawia się stwierdzenie, że związek inkluzyjny z wodorem został odkryty przez Habilitanta kilka lat temu 'a few years ago' przy czym odnośnik prowadzi do pracy z roku 2019 (?).

Praca **H6** dotyczy badań wysokociśnieniowych przeprowadzonych na związku organicznym o podobnej do arsenolitu budowie – urotropinie, które zostały przeprowadzone w celu sprawdzenia zachowania tego materiału pod podwyższonym ciśnieniem. Wyniki wskazały, że w tym przypadku związki inkluzyjne z helem czy też wodorem nie tworzą się co zostało wytłumaczone brakiem luk umożliwiających zapoczątkowanie procesu dyfuzji. Przy czym prowadzone eksperymenty pozwoliły na odkrycie nowej tetragonalnej fazy krystalicznej urotropiny oraz wykazały możliwość zastosowanie metody atomów Hirshfelda (HAR) do udokładnienia niekompletnych danych strukturalnych otrzymanych z wysokociśnieniowych pomiarów dyfrakcyjnych.

Pewien niedosyt budzi brak wyników badań dyfrakcyjnych pomiarów wysokociśnieniowych przeprowadzonych na izostrukuralnym z arsenolitem senarmontycie ( $Sb_2O_3$ ), w strukturze którego luki są znacznie mniejsze. Tego typu eksperyment mógłby wnieść cenne informacje na temat mechanizmu tworzenia prezentowanych związków inkluzyjnych. Przy czym Habilitant wspominał, że zamierza w przyszłości włączyć ten związek do swoich badań.



Praca **H5** przedstawia wyniki dyfrakcyjnych badań wysokociśnieniowych prowadzonych na kolejnej odmianie polimorficznej  $As_2O_3$  mianowicie kładetycie I. Jest dopełnieniem wyników prac badawczych prowadzonych dla uzyskania stopnia naukowego doktora, gdzie jeden z artykułów przedstawionego cyklu opisywał wyniki dyfrakcyjnych badań wysokociśnieniowych przeprowadzonych dla kładedytu II.

Prace **H7** i **H8** dotyczą syntezy i badań strukturalnych związków interkalacyjnych tlenku arsenu(III) z KCl oraz RbCl, które pozwoliły na wyodrębnienie uwodnionych interkalatów o różnej stechiometrii. Praca **H3** odbiegająca w swej naturze od pozostałych przedstawia zastosowanie definicji liczby koordynacyjnej zaproponowanej przez Prof. J. Zacharę do związków tlenowych arsenu i powiązania liczby koordynacyjnej arsenu(III) z aktywnością strukturalną wolnej pary elektronowej.

Podsumowując, przedstawione w cyklu publikacje stanowią spójny zestaw prac badawczych, a stosowana w nich metodyka świadczy o dobrej znajomości nowoczesnych metod badawczych. Pewien niedosyt budzi fakt, że przedstawione prace są niejako komentarzem do prac wykonanych podczas studiów doktoranckich (**D1-D5**) pod kierunkiem Prof. J. Zachary na których (**D2, D3, D5**) jest on też jednym z autorów korespondencyjnych. Przy czym, zgodnie z rekomendacjami Rady Doskonałości Naukowej dotyczącymi przesłanek warunkujących nadanie stopnia doktora habilitowanego, a w szczególności warunku posiadania w dorobku osiągnięć naukowych stanowiących istotny wkład w rozwój określonej dyscypliny, dozwolone jest przedłożenie do oceny wcześniejszego dorobku, uzyskanego czy to podczas przygotowywania rozprawy doktorskiej, czy też wyników wcześniejszej pracy naukowej, którą to interpretację przepisu Habilitant 'wprowadził w życie' w ramach prezentacji swych osiągnięć. Kolejny niedosyt budzi brak pracy monoautorskiej, w której Habilitant miałby dominujący wkład nie tylko koncepcyjny, ale też eksperymentalny. Wszystkie prezentowane prace są wieloautorskie. W pracy **H3** przygotowanej wspólnie z jednym współautorem, Prof. J. Zachara wskazuje jako swój wkład sprecyzowanie części koncepcji pracy dotyczącej opracowania nowych definicji liczby koordynacyjnej. Prof. J. Zachara wskazuje też swój wkład koncepcyjny w pracy **H5** dotyczącej badań strukturalnych prowadzonych na kładetycie I, gdzie jest jeszcze dwóch innych współautorów, którzy pomagali w przeprowadzeniu wysokociśnieniowych pomiarów dyfrakcyjnych, a Habilitant szacuje swój wkład na 70%. Warto byłoby przedyskutować z Habilitantem jego wkład, który określa jako wiodący we wszystkich pracach przedstawionego jako osiągnięcie naukowe cyklu.

Za najistotniejsze osiągnięcia Habilitanta uważam:

- odkrycie tworzenia związków inkluzyjnych arsenolitu z gazami stosowanymi jako inertne medium przenoszące ciśnienie podczas dyfrakcyjnych pomiarów wysokociśnieniowych
- wyniki badań (w tym obliczeniowych) dotyczące natury oddziaływań atomów helu z cząsteczkami tlenku arsenu(III) w utworzonym związku inkluzyjnym
- wskazanie osłabienia wiązania H-H w tworzonym związku inkluzyjnym arsenolitu z wodorem
- zastosowanie metody atomów Hirshfelda do określenia położenia atomów wodoru w strukturach bazujących na danych dyfrakcyjnych zebranych pod wysokim ciśnieniem
- powiązanie liczby koordynacyjnej arsenu(III) z aktywnością strukturalną wolnej pary elektronowej, wskazujące na to, że wzrost liczby koordynacyjnej w strukturach wyznaczonych pod ciśnieniem



atmosferycznym powoduje obniżenie aktywności strukturalnej pary elektronowej, przy czym wymuszone wysokim ciśnieniem zwiększenie liczby koordynacyjnej nie wpływa na tę aktywność

- wykazanie, że trwałość tworzonych interkalatów potasowych wzrasta wraz ze wzrostem promienia jonowego anionu halogenkowego.

Próby rozwiązania problemów badawczych takich jak wyjaśnienie mechanizmu wnikania helu w nieporowatą strukturę arsenolitu pod podwyższonym ciśnieniem, przyczyny rozszczepienia wibronu diwodoru na zarejestrowanych widmach ramanowskich w związku o zakładanym wzorze  $As_4O_6 \cdot 2H_2$  na trzy składowe, czy też stechiometrii tego związku inkluzyjnego nie zostały jeszcze zakończone sukcesem.

#### **IV. Działalność dydaktyczna, organizacyjna i popularyzująca naukę**

Habilitant w latach 2010-2022 prowadził zajęcia dydaktyczne obejmujące laboratoria: Chemia Nieorganiczna i Analityczna, Chemia, Polymer Electrolytes oraz ćwiczenia: Chemia Ogólna i Nieorganiczna, Chemia Nieorganiczna, Chemia, Podstawy Krystalografii Rentgenowskiej, wypełniając w ten sposób obowiązujące go pensum dydaktyczne. W latach 2018-2022 był mentorem czterech prac dyplomowych na stopień inżyniera i dwóch na stopień magistra. Pomagał też w przygotowaniu Pana Michała Fabiańskiego do udziału w IV Ogólnopolskiej Olimpiadzie Krystalograficznej, który zajął w tych zawodach 2 miejsce (za co Habilitant uzyskał dyplom IV Ogólnopolskiej Olimpiady Krystalograficznej, 2021). W ramach działalności dydaktyczno-popularyzatorskiej (2015-2017) był zaangażowany w indywidualne zajęcia laboratoryjne dla dwóch uczniów warszawskich szkół średnich realizowane w ramach staży Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego pt. „Uniwersytet i Politechnika dla Młodego Chemika” oraz zajęcia laboratoryjne na Chemicznym Obozie Naukowym dla zdolnej młodzieży licealnej. Był też opiekunem studenta prowadzącego badania laboratoryjne w ramach Wolontariatu Naukowego Wydziału Chemicznego Politechniki Warszawskiej, a w 2018 członkiem komisji oceniającej plakaty studentów na III Sesji Posterowej Wolontariatu Naukowego. W latach 2009-2014 uczestniczył w pracach związanych z przygotowaniem Olimpiad Chemicznych przez Komitet Główny Olimpiady Chemicznej działający przy Polskim Towarzystwie Chemicznym recenzując zadania i tłumacząc ich treść na język angielski. Od 2016 roku Habilitant związany jest z Kolegium Redakcyjnym przy Komitecie Głównym Olimpiady Chemicznej, gdzie przygotowuje m.in. zadania na Olimpiadę Chemiczną. Od roku 2020 prowadzi także zajęcia z chemii ogólnej i nieorganicznej oraz krystalografii na kursie przygotowawczym do Międzynarodowej Olimpiady Chemicznej organizowanym przez Komitet Główny Olimpiady Chemicznej. Warto też nadmienić, że w ramach popularyzacji nauki wygłosił w roku 2011 wykład zatytułowany „Atom – budowa materii” na Uniwersytecie Trzeciego Wieku Politechniki Warszawskiej oraz w tym samym roku poprowadził zajęcia „Akademia atomu” na Uniwersytecie Dzieci.

Przedstawiona powyżej aktywność w głównej mierze dydaktyczno-popularyzatorska, gdyż organizacyjna sprowadza się do uczestnictwa w przygotowaniach Olimpiad Chemicznych nie podlega zgodnie z ustawą z dnia 20 lipca 2018 roku ocenie, ale jest warta nadmienienia, w tym na szczególną pochwałę zasługuje zaangażowanie wnioskodawcy w przekazywanie entuzjazmu do nauki młodszemu pokoleniu.

## V. Wniosek końcowy

Podsumowując uważam, że wskazane przez dr inż. Piotra Aleksandra Guńkę osiągnięcia w ramach cyklu powiązanych ze sobą tematycznie 8 artykułów naukowych oraz wcześniej prowadzonych prac badawczych we wskazanej tematyce stanowią istotny wkład w rozwój dyscypliny nauk chemicznych.

Habilitant w powadzonych badaniach wykazuje się dużą aktywnością naukową realizowaną we współpracy z innymi ośrodkami naukowymi/grupami badawczymi. Tym samym spełnia on wymogi ustawy 'Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce' z dnia 20 lipca 2018 roku. Wnoszę więc o dopuszczenie dr inż. Piotra Aleksandra Guńki do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

W kene Dhor