



Poznań, dnia 5 lutego, 2018 roku

### Recenzja rozprawy doktorskiej

**Autor:** mgr Marcin Krzysztof Czapla  
**Tytuł:** Ocena mocy i stabilności wybranych superkwasów Lewisa-Brønsteda przy użyciu metod teoretycznych  
**Promotor:** prof. dr hab. Piotr Skurski

Przedłożona do recenzji praca zgodnie z tytułem i celem przedstawionym przez Autora przedstawia wyniki badań przy użyciu metod teoretycznych, w których oceniano m.in. moc i stabilności wybranych superkwasów Lewisa-Brønsteda. Główną hipotezą badawczą było założenie, iż na drodze protonowania odpowiednich anionów superhalogenowych można projektować nowe związki chemiczne, które będą wykazywały właściwości superkwasowe. Praca doktorska Pana mgr. Marcina Czapli została wykonana w Pracowni Chemii Kwantowej Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego pod kierunkiem Pana prof. dr hab. Piotra Skurskiego.

Jak wynika z dostarczonych informacji doktorant jest autorem 15 publikacji naukowych znajdujących się w bazie Journal Citation Reports, w 13 z nich jest pierwszym Autorem. Bezduszne dane scientometryczne wskazują, że prace Pana mgr. Marcina Czapli były cytowane (z wykluczeniem autocytowań) 34 razy, a indeks h równy jest 5. Biorąc pod uwagę bardzo krótki okres działalności naukowej, wszystko to razem wzięte daje dobry obraz aktywności naukowej doktoranta i sposób postrzegania jego prac przez innych naukowców.

Pod względem formalnym przedstawiona do oceny praca doktorska zredagowana jest w sposób, który może się podobać, tak pod względem redakcyjnym, ale co najważniejsze jest na wysokim poziomie merytorycznym. Przedstawiony mi do oceny materiał stanowi opracowanie w języku polskim, wsparte sześcioma oryginalnymi publikacjami w języku angielskim. Opracowanie w języku polskim zawiera się na 32 stronach i składa się z sześciu

MS



DZIEKANAT  
Wydziału Chemii UG

Wpłynęło dn. 12.02.2018r.  
L.dz. 8010-HC/KC-294/18

ul. Umultowska 89b, Collegium Chemicum, 61-614 Poznań  
tel. +48 61 829 1593, fax +48 61 829 1555  
sikorski@amu.edu.pl

[www.staff.amu.edu.pl/~photonlab](http://www.staff.amu.edu.pl/~photonlab)

rozdziałów zatytułowanych 1 Wstęp, 2 Cel pracy, 3 Metodyka, 4 Wyniki, 5 Podsumowanie, 6 Literatura. Po opracowaniu w języku polskim następują kopie sześciu oryginalnych stanowiących podstawę pracy doktorskiej, a opublikowanych w dobrych i bardzo dobrych czasopismach z tzw. Listy JCR, *Chem. Phys. Let.*, *J. Phys. Chem A.*, *Chem. Phys.*, *Int J. Quantum Chem.*, *RSC Adv.*, i *Phys. Chem. Chem. Phys.* Materiał ten uzupełniony został o oświadczenia autorskie, mgr. Marcina Krzysztofa Czapli, prof. dr hab. Piotra Skurskiego i dr hab. Iwony Anusiewicz prof. UG. Wszystkie te materiały zawarte są na 90 stronach. Najważniejszy niewątpliwie w całej rozprawie jest rozdział 4 Wyniki, który podzielony jest na sześć części, z których każda wsparta jest publikacją. Taki układ jest logiczny i niewątpliwie ułatwia poruszanie się po tematyce zaprezentowanych badań.

Rozdział **1. Wstęp**, stanowi eleganckie wprowadzenie w tematykę pracy doktorskiej, przedstawia w „pigułce” historię superkwasów, wprowadza czytelnika w tematykę zainteresowań doktoranta. Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, że ta często traktowana mechanicznie część pracy doktorskiej, pozwala Autorowi na przedstawienie swojego punktu widzenia, a czytelnikowi umożliwia zapoznanie się z Autorem i jego poglądami. Tekst jest napisany ładnym językiem, a dobór literatury wskazuje, że Autor zna i potrafi krytycznie dokonać analizy literatury przedmiotu. Rozdział ten wskazuje, że Autor ma swoje dobrze ukształtowane poglądy i potrafi je swobodnie wyrażać.

Nie powinno budzić zaskoczenia, że następny Rozdział **2. Cel pracy** przedstawia zwięzłe główny cel pracy i cele dodatkowe. Głównym celem sformułowanym przez Autora „była ocena mocy i stabilności wybranych superkwasów Lewisa-Brønsteda (układów o wzorach ogólnych  $HAInF_{3n+1}$  ( $n=1-4$ ),  $HIInF_{3n+1}$ ,  $HSnF_{4n+1}$ ,  $HSbF_{5n+1}$  i  $HAuF_{5n+1}$  ( $n=1-3$ )) przy użyciu metod teoretycznych. A główną hipotezą badawczą było założenie, iż na drodze protonowania odpowiednich anionów superhalogenowych można projektować nowe związki chemiczne, które będą wykazywały właściwości superkwasowe.” Wybrane do realizacji cele szczegółowe sformułowane są jasno. Rozdział ten kończy swoista deklaracja wiary połączonej z nadzieją, że „otrzymane wyniki umożliwią głębsze wniknięcie w naturę superkwasów Lewisa-Brønsteda w sensie ich właściwości fizykochemicznych, a także mechanizm ich tworzenia oraz czynniki warunkujące ich moc i stabilność”.

Rozdział **3. Metodyka** to solidna porcja wiedzy przedstawiona w bardzo skondensowanej i eleganckiej formie. Należy jednak podkreślić, że dokładna metodyka prowadzonych obliczeń opisana została w każdym z opublikowanych artykułów stanowiących integralną część rozprawy [publikacje D1-D6].

Rozdział **4 Wyniki** stanowi podstawową część pracy i zawiera w skondensowanej formie bardzo duży materiał badawczy wraz z jego krytyczną analizą. Uznanie recenzenta wzbudza

szeroki zakres badanych struktur, ale przede wszystkim ilość stosowanych technik badawczych oraz ich właściwy dobór w odniesieniu do postawionych sobie celów. Na uznanie zasługuje systematyczność i precyzja w planowaniu poszczególnych zadań, nie ma dla mnie wątpliwości, że wszystkie przedstawione w doniesieniu publikacje stanowią spójny tematycznie zbiór artykułów. Przedstawione wyniki i ich dyskusja to bogaty materiał. Za najważniejsze osiągnięcia Autora uważam wskazanie, że:

- układy  $HAInF_{3n+1}$  ( $n=1-4$ ) to w istocie podwójne superkwasy Lewisa-Brønsteda, natomiast odpowiadające im silnie związane aniony  $(AlnF_{3n+1})^-$  ( $n=1-4$ ) można uznać za ich naturalne prekursorzy - publikacja D1,

- wysunięcie hipotezy, że kwas ( $HSb_3F_{16}$ ), z wyznaczoną dla niego wartością entalpii swobodnej dla reakcji deprotonowania równą 230,3 kcal/mol, jest prawdopodobnie najmocniejszym superkwasem Lewisa-Brønsteda opisanym dotychczas w literaturze, publikacja D2,

- jako bardzo ciekawe należy uznać rozważania dotyczące możliwości uzyskania silnego superkwasu Lewisa-Brønsteda na drodze protonowania dowolnego anionu superhalogenowego, publikacja D3.

Rozdział 5 **Podsumowanie** przedstawia najważniejsze zdaniem Autora wnioski, ujęte w pięciu punktach, a wynikające z przeprowadzonych badań. Autor osiągnął stawiany i wszystkie cele szczegółowe. Najważniejsze osiągnięcia pracy opisałem omawiając Rozdział 4, można jeszcze dodać, że ciekawym wnioskiem przedstawionym przez Autora jest stwierdzenie, że istnieje silna zależność pomiędzy mocą badanych superkwasów Lewisa-Brønsteda a wertykalną energią odrywania elektronu ( $VDE$ ) anionów superhalogenowych użytych w roli ich prekursorów. A wartość energii  $VDE$  jest, według Autora, prawdopodobnie najważniejszym czynnikiem determinującym moc superkwasów Lewisa-Brønsteda w fazie gazowej.

Rozdział 6 **Literatura** zawiera spis 63 pozycji literaturowych wykorzystywanych w opracowaniu w języku polskim.

Następne strony to odpowiednio kopie publikacji D1-D6 oraz oświadczenia autorskie. Praca napisana jest bardzo dobrym językiem, zawiera wiele oryginalnych i ważnych wyników, z których w recenzji wymieniłem tylko najważniejsze.

Pytaniem, które nurtuje recenzenta, a zapewne nie tylko jego, jest pytanie o stopień trafności i ogólności w przewidywaniu mocy superkwasów.

Jak wynika ze sformułowanych wcześniej opinii zasadnicze cele pracy zostały przez Doktoranta zrealizowane. Praca doktorska mgr. Marcina Czapli spełnia, często z dużym

W >

nadmiarem, wszystkie wymagania sformułowane w kryteriach formalnych stawianych kandydatom do stopnia naukowego doktora.

Podsumowując, uważam, że przedstawiona mi do recenzji praca doktorska mgr. Marcina Krzysztofa Czapli pt. „Ocena mocy i stabilności wybranych superkwasów Lewisa-Brønsteda przy użyciu metod teoretycznych” spełnia w pełni ustawowe i zwyczajowe kryteria stawiane rozprawom doktorskim. Składam wniosek o dopuszczenie mgr. Marcina Krzysztofa Czapli do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Ponadto stawiam wniosek o wyróżnienie w/w pracy, ze względu na jej bardzo wysoki poziom naukowy. Pracę oceniam, jako bardzo interesującą i bardzo wartościową, a za najważniejsze osiągnięcia pracy uważam te wymienione przy omawianiu rozdziału **5 Wyniki**. Podkreślić należy, że wyniki pracy zostały opublikowane w sześciu dobrych i bardzo dobrych czasopismach z listy JCR. Stanowi to niewątpliwie niezależne potwierdzenie wagi wybranej tematyki, jakości badań i dyskusji wyników prowadzonych przez doktoranta. W mojej opinii praca zasługuje na wyróżnienie.



prof. dr hab. Marek Sikorski