

Warszawa, 16.02.2022 r.

Prof. dr hab. Wojciech Grochala
Laboratorium Technologii Nowych Materiałów Funkcjonalnych
Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego
Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warszawa

Opinia o osiągnięciu naukowym oraz całokształcie dorobku naukowego pana dr. Dariusza Szczepanika

Według przedłożonej mi dokumentacji związanej z wnioskiem Pana dr. Dariusza Szczepanika do Rady Dyscypliny Nauk Chemicznych UJ o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk chemicznych, badania aplikanta powiązanie z osiągnięciem przedstawianym do oceny dotyczą opisu teoretycznego cząsteczek aromatycznych. Badania koncentrowały się na wielu rodzajach układów, od małych cząsteczek modelowych po bardzo duże. Dalekosiężnym celem badań było ilościowe opisanie stopnia delokalizacji gęstości elektronowej w układach wielocentrowych, zresztą nie tylko opartych o atomy węgla.

Wyniki badań opisane zostały w dziewięciu pracach oryginalnych oraz w jednej przeglądowej. Pan dr Szczepanik występował w nich zawsze jako pierwszy autor, oraz jako autor korespondencyjny (co najmniej jako jeden z dwóch, choć zazwyczaj jako jedyny). Badania opisane w pracach są w znacznej mierze wynikiem realizacji projektów prowadzonych przez dr. Szczepanika (Sonata i staż zagraniczny w ramach programu M. Skłodowskiej-Curie) i ma On kluczowy wkład w zaplanowanie badań; nie ulega wątpliwości, iż był On pomysłodawcą badań i kluczowym ich elementem sprawczym. Przedstawiony dorobek jest bez wątpienia solidny, zwarty tematycznie i wpisuje się w dobrze zakreślony

temat badawczy. Wyniki zostały opublikowane w porządnych czasopismach branżowych typowych dla dziedziny chemii fizycznej (*CPL, PCCP, itp.*) i teoretycznej (*CTC, JCC, IJQC*), choć brak jest prac w prestiżowych czasopismach interdyscyplinarnych głównego nurtu.

Baza danych Scopus (akces 15 lutego 2022 r.) wymienia trzydzieści dziewięć publikacji dr. Szczepanika ($H=14$), gromadzących łącznie ponad 300 cyt. obcych; brak jest prac znaczących (tzn. mających ponad 100 cyt. obcych) a najlepiej cytowane prace (z 2014 r. i 2017 r.) mają, odpowiednio, 34 i 32 cyt. obce. Cytowania obce są jednak na krzywej wznoszącej. To dobry wynik zważywszy na etap kariery naukowej dr. Szczepanika; po części wynika on z możliwości współpracy z bardzo dobrymi grupami teoretycznymi poczynawszy od tej, z której wyrósł (Mrozek, Nalewajski), po te z którymi mógł współpracować na dalszym etapie kariery (Krygowski, Sola i in.). Oświadczenia współautorów nie pozostawiają wątpliwości, że rola dr. Szczepanika w konceptualizację pracy, powstanie wyników i ich analizę była wiodąca.

Przejdę do meritum sprawy, czyli do kwestii naukowych powiązanych z ocenianym osiągnięciem.

Głównym osiągnięciem habilitanta wydaje się być wprowadzenie do literatury przedmiotu nowego narzędzia do analizy stopnia delokalizacji gęstości elektronowej, nazwanego electron density of delocalized bonds, EDDB. EDDB to matematycznie stosunkowo prosty konstrukt, a jego wyliczenie używa małych zasobów komputerowych; aż dziw, że nie zaproponowano go wcześniej, gdyż jest dość intuicyjny. Wydaje się jednak być bardzo pożytecznym narzędziem analizy formalnej, dającym ilościowy wgląd w stopień zdelokalizowania rozmaitych rodzajów elektronów. Jego przydatność została potwierdzona krytycznymi obliczeniami dla wielu różnych układów aromatycznych, antyaromatycznych i niearomatycznych. Dr Szczepanik analizował wiele cząsteczek węglowych, ale także cząsteczki nieorganiczne mogące być nosicielami aromatyczności. Indeks EDDB niskim

kosztem radzi sobie dobrze z opisem stopnia delokalizacji gęstości elektronowej we wszystkich tych układach a jego przewidywania wydają się przyzwoicie korelować z tymi będącymi wynikiem zastosowania bardziej klasycznych podejść. W analizach dr Szczepanik nie unikał układów trudnych tj. sprawiających kłopoty innym indeksom, z dobrym skutkiem w przypadku stosowania EDDB.

O ile cząsteczki aromatyczne czy samo pojęcie aromatyczności wydają się być wystarczająco ważną przesłanką do podjęcia tego typu badań, zastosowanie indeksu EDDB jest z pewnością znacznie szersze. Narzędzie to może być stosowane wszakże do dowolnej cząsteczki chemicznej, makrocząsteczki, klastrów, czy ciała stałego. Przypadki, które są szczególnie interesujące to (i) częściowo zdearomatyzowane rodnikokationy i rodnikoaniony wywodzące się z układów aromatycznych, nie będące ani aromatycznymi ani antyaromatycznymi, (ii) wiązania trójcentrowe sigma w B₂H₆ (klasyczne wiązanie wielocentrowe) oraz z wyższych wodorkach boru (tworzących wiele fascynujących rodzin strukturalnych), a także w strukturze pierwiastkowego boru w różnych jego odmianach alotropowych, (iii) *casus* tzw. wiązania metalicznego, które z natury rzeczy wiele zawdzięcza delokalizacji (a z którego porządnym opisem chemia nie uporała się nigdy), oraz klastrów metali, które wraz z rosnącą liczbą atomów składowych pokonują próg rzeczony metaliczności, (iv) związki wielocentrowe zawierające ligandy mostkowe, czy wreszcie najważniejszy chyba bo najbardziej ogólny przypadek (v) stanu przejściowego reakcji chemicznej. Aż korci by zastosować indeks EDDB do przypadku reakcji $H^+ + H_2 \rightarrow H_2 + H^+$ i prześledzić jego zmienność w funkcji współrzędnej reakcji. Stosowalność EDDB można by następnie poszerzyć na wiele ważnych typów reakcji chemicznych, takich jak substytucja nukleofilowa typu S_N2, podstawienie elektrofilowe w benzenie, ważne reakcje zachodzące w organizmach żywych, etc. Można mieć nadzieję, że autor indeksu poszerzy w przyszłości twórczo swoje badania na te i inne układy i procesy oraz iż dostarczą one ciekawych uogólnień.

Analizując użyteczność indeksu EDDB nie sposób nie wspomnieć, że nie może to być rzecz jasna narzędzie dostarczające ultra-precyzyjnych liczb bezwzględnych; wszystkie wyniki otrzymane z jego użyciem są obarczone błędami wynikającymi z wcześniejszego obliczenia gęstości elektronowej i im precyzyjniej jest ona obliczona tym bardziej wiarygodne wyniki można uzyskać stosując EDDB. Nie jest to jednak zarzut niwelujący zasadność stosowania nowego indeksu, gdyż taką samą przywarę mają wszystkie metody matematycznej post-analizy gęstości elektronowej włącznie z klasyczną już analizą Badera.

Przy dużej sympatii dla zupełnie nowych prób opisu i zrozumienia wiązań chemicznych – co jest wszak jednym z głównych celów chemii – nie mam pewności, czy EDDB wejdzie na dobre do użytku w środowisku naukowym. Człowiek jest z natury stworzeniem leniwym i niechętnie rezygnuje z raz wypracowanych standardów; doskonałym przykładem jest Paulinga definicja elektroujemności; mimo, iż jest ona dużo mniej precyzyjna od wielu innych, by nie rzecz bałaganiarska, a jej stosowalność ograniczona, do dziś stanowi ona najpowszechniej używaną definicję tego kluczowego przecież dla chemików pojęcia. Wydaje mi się, że bez podjęcia prób zainteresowania szerszego grona chemików indeksem EDDB, choćby poprzez publikacje w *Accounts of Chemical Research* czy podobnym czasopiśmie, o sukcesie nie ma co marzyć. Wysłuchawszy kolokwium habilitacyjnego dr. Szczepanika mogę stwierdzić, że jest On w stanie przejrzeć i atrakcyjnie zaprezentować swoje badania, co powinno pomóc w publikowaniu w czasopismach interdyscyplinarnych dla dużo szerszej społeczności niż chemicy teoretycy; jednak wysiłek taki trzeba po prostu podjąć.

Ocena dorobku naukowego dr. Szczepanika nie może abstrahować od innych elementów, nie będących bezpośrednią składową omówionego już osiągnięcia. Dr Szczepanik opublikował znaczną liczbę prac w większości wieloautorskich, przy czym część została dobrze przyjęta przez środowisko naukowe. Ustne wystąpienia konferencyjne nie są zbyt liczne i tylko nieliczne są na zaproszenie organizatorów; to jednak ma szansę zmienić się w miarę, gdy

kariera naukowa habilitanta będzie dojrzewać. Na tym etapie należałoby jednak zrezygnować z prezentacji posterów, pozostawiając to studentom. Dr Szczepanik czyni wysiłki w celu pozyskania środków na badania naukowe w formie grantów, zdobywanych w procedurach konkursowych; choć nie zawsze kończy się to sukcesem (Sonata Bis), wszelkie próby należy uznać za zjawisko pozytywne. Umiejętność nawiązywania przez dr. Szczepanika współpracy naukowej również nie podlega dyskusji; myślę, że zyskałby On jeszcze więcej podejmując współpracę z eksperymentalistami. Jedyna kwestia, która nie jest dla mnie oczywista dotyczy kształcenia młodzieży; czy realizacja projektu Sonata nie zaowocowała choćby jedną pracą licencjacką lub magisterską ukończoną pod opieką dr. Szczepanika? Dopiero po nabyciu takich doświadczeń można myśleć o odpowiedzialnym promowaniu doktorów.

W podsumowaniu, moja ocena dorobku dr. Szczepanika jest jednoznacznie pozytywna. Uzyskane przezeń wyniki potwierdzają zasadność wprowadzenia i użycia nowego indeksu delokalizacji gęstości elektronowej, EDDB, do opisu wiązań chemicznych w układach węglowych i nie tylko. Badania teoretyczne dr. Szczepanika pozwoliły usunąć niektóre niedogodności wynikające z użycia alternatywnych deskryptorów. Co ważne w praktyce, nowy indeks ma stosowalność do każdego układu chemicznego, a wyniki można uzyskiwać bardzo szybko i z użyciem skromnych zasobów obliczeniowych. Wysoka wartość poznawcza uzyskanych wyników naukowych nie podlega dyskusji, podobnie jak wiodący wkład kandydata w zaplanowanie i przeprowadzenie badań, wyciągnięcie wniosków i przedstawienie ich naszej społeczności w postaci publikacji naukowych. Drobne opisane wyżej niedociągnięcia nie podważają sedna sprawy. W mojej opinii dr Szczepanik jest dojrzałym naukowcem, który powinien uzyskać prawo promowania doktorów. Mam przy tym nadzieję, że młody badacz nie zasklepi się w tematyce EDBB i będzie w stanie proponować nowe koncepcje w nauce.

Uważam, że przedstawione osiągnięcia całkowicie spełniają wymagania stawiane w Ustawie kandydatom na doktora habilitowanego i należy dopuścić aplikanta do dalszych etapów postępowania. Ze względu na wysoki poziom badań rekomendowałbym Radzie Dyscypliny Chemia UJ rozważenie możliwości wnioskowania o wyróżnienie tej rozprawy habilitacyjnej tak przez wewnętrzne jak i zewnętrzne gremia.



Prof. Wojciech Grochala