

Kraków, 12.04.2022 r.

**Uchwała z dnia 12.04.2021 Komisji habilitacyjnej powołanej w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne, wszczętym na wniosek dr. Dariusza Wojciecha Szczepanika w dn. 24.06.2021 r.**

**§ 1**

Komisja habilitacyjna, powołana przez Radę Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Jagiellońskiego, uchwałą nr 2/I/2022 z dnia 20.01.2022, działając na podstawie art. 221 ust. 10 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478), obradowała w dniu 12.04.2022 r. na posiedzeniu zdalnym, za pośrednictwem platformy Teams.

Po zapoznaniu się z recenzjami i dokumentacją wniosku Komisja stwierdza, że aktywność naukowa doktora Dariusza Wojciecha Szczepanika oraz jego osiągnięcia naukowe pt. „*Gęstość elektronowa wiązań zdelokalizowanych jako uniwersalne narzędzie w badaniu globalnych i lokalnych efektów rezonansu chemicznego*” stanowią istotny wkład w rozwój dyscypliny naukowej nauki chemiczne i **wyraża pozytywną opinię w sprawie nadania dr. Dariuszowi Wojciechowi Szczepanikowi stopnia doktora habilitowanego** w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne, uznając spełnienie przesłanek warunkujących nadanie stopnia doktora habilitowanego, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt 1-3 wskazanej ustawy.

**UZASADNIENIE**

Komisja zapoznała się z przedstawionym przez dr. Dariusza Szczepanika osiągnięciem naukowym pt. „*Gęstość elektronowa wiązań zdelokalizowanych jako uniwersalne narzędzie w badaniu globalnych i lokalnych efektów rezonansu chemicznego*”, przedstawionym w formie zbioru 9 publikacji oraz jednego rozdziału przeglądowego w książce zasięgu międzynarodowym, jego pozostałym dorobkiem naukowym oraz z recenzjami oraz opiniami członków Komisji.

Po przeanalizowaniu całokształtu dorobku naukowego habilitanta oraz jego aktywności w zakresie organizacji oraz współpracy naukowej a następnie dyskusji, w wyniku jawnego głosowania Komisja jednomyślnie (7 głosów TAK, 0 głosów NIE, 0 głosów WSTRZYMUJĄCYCH SIĘ) uznała dokumentację złożoną przez dr. Dariusza Wojciecha Szczepanika za spełniającą, zarówno od strony merytorycznej jak i formalnej, wymagania ustawowe stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Komisja uznała, że dr Dariusz Wojciech Szczepanik spełnia wszystkie wymogi ustawowe z art. 219 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce: posiada stopień doktora nauk chemicznych, wykazuje się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej instytucji oraz posiada w dorobku osiągnięcia naukowe, stanowiące znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne, w tym jeden cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopiśmie naukowych oraz rozdziału przeglądowego, przy czym, osiągnięcie to stanowi część pracy zbiorowej, w której opracowanie wydzielonego zagadnienia jest dominującym wkładem habilitanta. Swoją aktywność

naukową habilitant realizował również poza swym macierzystym instytutem zarówno w ramach staży długoterminowych oraz krótkoterminowych w Instytucie Chemii Obliczeniowej i Katalizy w Hiszpanii.

Prace te stanowią bardzo ciekawy, solidny i spójny tematycznie cykl publikacji, które w znacznym stopniu przyczyniły się do rozwoju oryginalnie zaproponowanego przez Dr. D. Szczepanika formalizmu matematycznego zwanego rzutem "wiązanie-orbital" oraz opartej na nim tzw. metodzie gęstości elektronowej wiązań zdelokalizowanych (EDDB, *electron density of delocalized bonds*). Dr D. Szczepanik wykorzystał zaawansowane metody teorio-informacyjnej koncepcji wiązania chemicznego do sformułowania ścisłych kryteriów ilościowych jakie muszą spełniać orbitale wiązań chemicznych, aby możliwa była delokalizacja elektronów. Następnie, Dr Szczepanik wykorzystał wspomniane kryteria do opracowania i zaimplementowania metody EDDB, która daje unikalną możliwość wizualizacji i kwantyfikacji jednego z najbardziej fundamentalnych efektów w rezonansowej teorii struktury elektronowej - aromatyczności chemicznej. Warto podkreślić nowatorskie podejście w prowadzonych badaniach, których celem było wytworzenie możliwie najbardziej uniwersalnego narzędzia do analizy delokalizacji elektronowej w cząsteczkach aromatycznych i nie tylko, dowolnego typu, rozmiaru, topologii i w dowolnym stanie elektronowym. Otwiera ono również nowe możliwości poznawcze, szczególnie w kontekście badań nad strukturą stanów wzbudzonych cząsteczek aromatycznych. Dodatkowo, Dr D. Szczepanik zaproponował model „wędrujących  $\pi$ -cykli”, będący uogólnieniem modelu „wędrującego  $\pi$ -sektetu Clara”, który reprezentuje alternatywne podejście względem zaproponowanego w literaturze rozwiązania teorio-grafowego.

Dr Dariusz Szczepanik legitymuje się także bardzo dobrymi osiągnięciami w zakresie całościowego dorobku naukowego, edukacji, aktywności w zdobywaniu środków finansowych na badania naukowe ze źródeł zewnętrznych oraz współpracy międzynarodowej.

Załącznik nr 1 do niniejszej uchwały, zawierający protokół z posiedzenia Komisji, będący podstawą uzasadnienia Uchwały Komisji, stanowi jej integralną część.

## § 2

Na niniejszą uchwałę nie przysługuje zażalenie. Uchwała wchodzi w życie z dniem jej podjęcia.

Przewodniczący komisji

prof. dr hab. Marcin Hoffmann

Załącznik:

1. Protokół posiedzenia Komisji habilitacyjnej z dnia 12.04.2022 r.