



We are a part of  
the European University  
of Post-Industrial Cities



Łódź, dnia 21/03/2023

**FACULTY OF  
CHEMISTRY**

University of Lodz

prof. dr hab. Marcin Palusiak  
Department of Physical Chemistry  
Faculty of Chemistry, University of Lodz  
Pomorska 163/165, 90-236 Lodz, Poland  
mobile phone: +48 504984038  
phone: +48 42 6355737  
fax: +48 42 6355744  
e-mail: marcin.palusiak@chemia.uni.lodz.pl

### **Recenzja wniosku habilitacyjnego**

**W związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego nauk  
ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne  
dr. Tomaszowi Siodła.**

Niniejszą recenzję sporządzam w związku z powołaniem mnie na recenzenta w postępowaniu habilitacyjnym wszczętym na wniosek dr Tomasza Siodły, o czym informuje pismo z Uchwałą nr L.dz. WCH/62/MB/2023 Rady Doskonałości Naukowej Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu z dnia 24 lutego 2023 roku.

Ocenę dorobku habilitacyjnego przeprowadziłem w oparciu o ustawę z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (aktualne odniesienie do aktu prawnego - tekst jednolity: DzU z 2022 r. poz. 574, 583, 655, 682, 807, 1010, 1079, 1117, 1459, 2185, 2306, z 2023 r. poz. 212.).

Podstawę ocenianego materiału stanowi zbiór dokumentów, których kompletność pozwala dokonać oceny merytorycznej przedłożonego wniosku.

## **Sylwetka naukowa habilitanta**

Dr Tomasz Siodła ukończył studia chemiczne na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu w roku 2008, uzyskując tytuł zawodowy magistra chemii, a w pięć lat później, czyli w roku 2013, uzyskał stopień naukowy doktora chemii, broniąc pracę doktorską wykonaną w UAM pod kierunkiem prof. Henryka Koroniaka. Wniosek habilitacyjny dr T. Siodła złożył w listopadzie roku 2022, dziewięć lat po uzyskaniu stopnia naukowego doktora. W czasie od ukończenia studiów do chwili obecnej dr Siodła jest zatrudniony w Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Z dokumentacji wniosku habilitacyjnego wynika także, że dr Tomasz Siodła odbył staż podoktorski w Collège de France w Paryżu, co może być nie bez znaczenia formalnego.

## **Opinia dotycząca osiągnięć naukowych dr Tomasza Siodły**

Podstawę ocenianego dorobku habilitacyjnego stanowi seria dziesięciu artykułów naukowych opublikowanych w recenzowanych pismach o zasięgu międzynarodowym. Wszystkie prace są pracami wieloautorskimi. Jak wynika z oświadczeń współautorów oraz wyjaśnienia dr T. Siodły, jego udział był w pracach ściśle określony, a jego indywidualny wkład w powstanie artykułów był istotny, w kilku pracach wiodący. W czterech z dziesięciu prac dr Siodła był autorem korespondencyjnym. Warto zauważyć, że w dwóch ostatnich pracach w cyklu dr Siodła określa swój udział jako udział autora koncepcji pracy.

Wszystkie prace w cyklu dotyczą efektu podstawnikowego, zagadnienia leżącego u podstaw teorii chemii organicznej. A zatem tematykę badawczą reprezentowaną przez habilitanta można określić jako teoretyczną fizyczną chemię organiczną. W badaniach dr Siodła wykorzystuje obliczenia kwantowo-chemiczne, głównie bazujące na modelu wywodzącym się z teorii funkcjonału gęstości. Poziom przybliżenia stosowanego w obliczeniach oceniam na adekwatny do potrzeb wynikających z podjętego problemu. W celu numerycznego oszacowania wpływu podstawników na badane układy molekularne zastosowano między innymi indeksy aromatyczności, w tym indeks HOMA bazujący na cechach strukturalnych cząsteczek chemicznych oraz indeks NICS, bazujący na właściwościach magnetycznych tych

cząsteczek. Ponadto habilitant analizował parametry zdefiniowane w ramach teorii QTAIM, NBO, wymieniwszy indeksy pEDA i sEDA, dane strukturalne badanych cząsteczek oraz przesunięcie chemiczne, będące parametrem wywodzącym się ze eksperymentu NMR, ale w pracach habilitanta analizowanym w oparciu o obliczenia teoretyczne. W części prac dane pozyskane teoretycznie są konfrontowane ze stałymi Hammetta, parametrami wywodzącymi się z eksperymentu i ogólnie uznanymi za powszechnie stosowaną miarę wpływu podstawników na podstawioną cząsteczkę chemiczną. W mojej ocenie szczególną wartość poznawczą posiadają następujące elementy badań dr Tomasza Siodły:

- a) Koncepcja rozseparowania efektu podstawnikowego na składowe wynikające z oddziaływania danego podstawnika z odpowiednimi fragmentami układu podstawionego, np. podstawionego pierścienia, tzw. centrum reaktywnego (ta konkretna koncepcja stanowiła też podstawę badań Hammetta), czy interakcji zwrotnej z tym centrum, w pracach habilitanta określonego mianem "reverse substituent effect", czyli tzw. odwrotnym efektem podstawnikowym. Takie koncepcyjne rozseparowanie efektu, który w warunkach badanych objawia się wielowymiarowo i do tej pory tak był charakteryzowany, pozwala na dogłębne rozpoznanie podjętego problemu na poziomie elementarnym, umożliwiającym uniwersalne zrozumienie zjawisk towarzyszących podstawieniu chemicznemu.
- b) Odejście od rozumienia efektu podstawnikowego zgodnie ze schematem klasycznej chemii organicznej, w której efekt ten jest niemal przypisany układom aromatycznym. W swoich pracach habilitant wraz ze współautorami dowiódł, że dla odpowiedników niearomatycznych, ale pi-elektronowo-sprzężonych, zjawisko komunikacji między grupami chemicznymi nie tylko zachodzi, ale jest po wielokroć bardziej efektywne niż - zgodnie z klasycznym przypisaniem - w układach aromatycznych. Doskonałym przykładem jest tu porównanie efektu podstawnikowego zachodzącego w pierścieniu benzenowym (archetyp układu aromatycznego) z analogami niearomatycznymi, tj. cykloheksa-1,3-dienem oraz bicyklooktanem. Jest to nowatorskie podejście przełamujące pewien ortodoksyjny pogląd pokutujący w akademickiej literaturze i ograniczający dyskusję efektu podstawnikowego do aromatycznych pochodnych benzenu.

Powyższe dwa aspekty pracy badawczej habilitanta, tu opisane bardzo ogólnie na potrzeby opracowania w formie recenzji, w mojej opinii mogą być uznane za

osiągnięcia naukowe stanowiące znaczący wkład w rozwój określonej dyscypliny, w tym przypadku dyscypliny nauki chemiczne, ze szczególnym wskazaniem na teorię chemii organicznej.

Prace stanowiące podstawę wniosku habilitacyjnego stanowią cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach naukowych które były ujęte w części A wykazu czasopism naukowych ustalonego na podstawie przepisów wydanych na podstawie art. 44 ust. 2 ustawy uchylanej w art. 169 pkt 4 i ogłoszonego komunikatem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 25 stycznia 2017 r. Warto nadmienić, że prace te były cytowane ponad 156 razy (bez tzw. autocytowań), czyli średnio około 16 razy na pracę, co w przypadku badań podstawowych stanowi jeden z bardziej wymiernych efektów wkładu autora w szeroko pojętą wiedzę o badanych zjawiskach.

Podsumowując, stosownie do art. 221 ust. 8 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce, stwierdzam, że osiągnięcia naukowe dr Tomasza Siodły, przedłożone w formie dokumentacji wniosku habilitacyjnego, odpowiadają wymaganiom określonym w art. 219 ust. 1 pkt 2 tejże ustawy.



Marcin Palusiak.