

UNIWERSYTET  
WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE

dr hab. **Maciej Maciejczyk**, prof. UWM

Katedra Fizyki i Biofizyki

Olsztyn, dnia 24.06.2024

### Ocena osiągnięcia naukowego

„Symulacje komputerowe dynamiki stanów wzbudzonych. Mechanizmy fotorelaksacji,  
oddziaływania międzycząsteczkowe i widma czasowo-rozdzielcze”

oraz całokształtu dorobku naukowego **dr Michała Andrzeja Kochmana**

Pan dr Michał Andrzej Kochman ukończył studia magisterskie w Wyższej Szkole Nauki i Inżynierii Uniwersytetu Edynburskiego w 2010 roku uzyskując ocenę celującą. Następnie na tej samej uczelni rozpoczął studia doktoranckie, które w roku 2014 zakończyły się obroną rozprawy doktorskiej zatytułowanej „*Ab initio simulations of reactions occurring in molecular crystals*” wykonanej pod kierunkiem prof. dr Carole A. Morrison i prof. dr Benedicta Leimkuhlera. Po obronie doktoratu Habilitant odbył trzy staże podoktorskie: w Instytucie Maksa Plancka ds. Struktury i Dynamiki Materii (2013-2017), na Wydziale Fizyki, Chemii i Biologii Uniwersytetu w Linköping (2018-2019) oraz na Wydziale Chemii University College London (2019). Warto podkreślić, że po pierwszym stażu podoktorskim dr Kochman został kierownikiem grupy teoretycznej w zespole badawczym, w którym ten staż odbywał, którą to funkcję pełnił w latach 2017-2018. Od roku 2020 dr Kochman zatrudniony jest na stanowisku adiunkta w Instytucie Chemii Fizycznej PAN.

### Osiągnięcie naukowe

Osiągnięcie naukowe, o którym mowa w art. 219 ust. 1 pkt 1-3 Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018r, dr Michała Andrzeja Kochmana zostało przedstawione w postaci ośmiu [H1-H8] wieloautorskich publikacji naukowych opublikowanych w czasopismach z listy JCR w latach 2015-2022. Wszystkie przedstawione prace mają charakter prac badawczych i opublikowane zostały w renomowanych czasopismach (ACS i RSC) o sumarycznym współczynniku oddziaływania wynoszącym niemal 29. Habilitant jest pierwszym i korespondencyjnym autorem we wszystkich publikacjach cyklu habilitacyjnego za wyjątkiem dwuautorskiej publikacji H5, w której jest tylko autorem

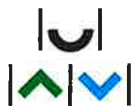
UNIWERSYTET WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE

Katedra Fizyki i Biofizyki

ul. Michała Oczapowskiego 4, 10-718 Olsztyn

tel. (89) 523 32 34    maciej.maciejczyk@uwm.edu.pl

fax (89) 523 38 61    www.uwm.edu.pl/wnz/node/508



UNIwersytet  
WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE

dr hab. **Maciej Maciejczyk**, prof. UWM

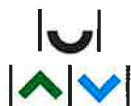
Katedra Fizyki i Biofizyki

korespondencyjnym. Prace przedstawione w cyklu habilitacyjnym jak dotąd cytowane były 87 razy (Web of Science – 19.06.2024), przy czym należy zauważyć, że w chwili składania wniosku habilitacyjnego (grudzień 2023) liczba cytowań wynosiła 66 (załącznik nr 4). W tym kontekście należy odnotować szybko rosnące zainteresowanie międzynarodowej społeczności naukowej badaniami prowadzonymi przez dr Kochmana. Prace należące do cyklu habilitacyjnego podzielone zostały przez Habilitanta na dwie grupy: prace w których badane są sondy fluorescencyjne (H1-H4, H7) oraz prace dotyczące związków, w których zachodzi proces fotoizomeryzacji (H5, H6, H8). Cel nadrzędny wszystkich przedstawionych publikacji polega na wyjaśnieniu mechanizmów obserwowanych doświadczalnie procesów fotorelaksacji wybranych związków chemicznych za pomocą zaawansowanych metod chemii kwantowej oraz dynamiki klasyczno-kwantowej. W moim odczuciu trudno przecenić wartość tego rodzaju badań, gdyż pozwalają one na interpretację danych doświadczalnych na poziomie struktury elektronowej cząsteczki, co znacznie pogłębia poziom zrozumienia badanych procesów. W większości prac cyklu (oprócz prac H2 i H6) Habilitant zastosował metodę nieadiabatycznej dynamiki molekularnej (NAMD) – zaawansowane narzędzie obliczeniowe, pozwalające na badanie procesów fotorelaksacyjnych.

W pracach H1, H4 i H7 Habilitant zastosował metodę NAMD do zbadania procesu fotorelaksacji 4-(N,N-dimetylamino)benzonitrylu (DMABN) – sondy fluorescencyjnej, dla której położenie pasm emisji silnie zależy od polarności ośrodka, w którym została ona umieszczona. Dla cząsteczki DMABN-u obserwuje się dwa pasma fluorescencji – tzw. pasmo normalne, rejestrowane w rozpuszczalniku niepolarnym oraz pasmo anomalne, które pojawia się obok pasma normalnego w rozpuszczalniku polarnym. Stosunek intensywności obu pasm pozwala na oszacowanie polarności ośrodka otaczającego sondę w badanym układzie.

W publikacji H1 zastosowano metodę NAMD do zbadania dynamiki relaksacji DMABN-u po jego wzbudzeniu do stanu  $S_2$  w fazie gazowej. Najważniejszym osiągnięciem autorów publikacji H1 jest określenie skali czasowej konwersji wewnętrznej  $S_2 \rightarrow S_1$  na poziomie ok. 20 fs i pokazanie, że po zajściu tego procesu dochodzi do znacznie wolniejszej rotacji wewnątrzcząsteczkowej. Wynik ten, negujący interpretację danych doświadczalnych Wernera Fuß i współpracowników, został później potwierdzony w pracach dwóch innych grup badawczych przeprowadzonych metodami obliczeniowymi.

UNIwersytet WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE  
Katedra Fizyki i Biofizyki  
ul. Michała Oczapowskiego 4, 10-718 Olsztyn  
tel. (89) 523 32 34    maciej.maciejczyk@uwm.edu.pl  
fax (89) 523 38 61    www.uwm.edu.pl/wnz/node/508



UNIWERSYTET  
WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE

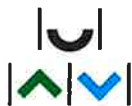
dr hab. **Maciej Maciejczyk**, prof. UWM

Katedra Fizyki i Biofizyki

W publikacji H4 podjęto próbę zrozumienia mechanizmu podwójnej fluorescencji DMABN-u w środowisku polarnym. W tym celu przeprowadzono symulacje NAMD cząsteczki DMABN-u zanurzonej w nanokropki wody, której ewolucja czasowa opisywana była za pomocą klasycznej dynamiki newtonowskiej. Najważniejszym wnioskiem z tej pracy jest jednoznaczne wskazanie struktury odpowiedzialnej za powstawanie anomального pasma fluorescencji (tzw. struktura  $S_1$ -TICT). Autorzy pokazują również, że obecność polarnego rozpuszczalnika doprowadza do stabilizacji struktury  $S_1$ -TICT, w wyniku czego dochodzi do znacznego zwiększenia jej populacji. Bardzo ważny wniosek z tej pracy polega na zanegowaniu istnienia pośredniej struktury (RICT), sugerowanej przez inne zespoły badawcze.

W ostatniej pracy związanej z tematyką fotorelaksacji cząsteczki DMABN-u (H7) przeprowadzono symulacje NAMD w nanokropki acetonitrylu, mające na celu wyjaśnienie zarejestrowanych doświadczalnie widm absorpcji przejściowej tego związku chemicznego. W pracy pokazano, że strukturą odpowiedzialną za powstanie głównego pasma w widmie absorpcji przejściowej jest struktura  $S_1$ -LE, która w wyniku izomeryzacji przechodzi w strukturę  $S_1$ -TICT, co powoduje stopniowy zanik tego pasma w widmie. Połączenie wyników trzech prac H1, H4 i H7 doprowadziło do zaproponowania całościowego modelu fotofizyki DMABN-u wyjaśniającego strukturę widm zarejestrowanych dla tego związku, co w moim odczuciu stanowi znaczące osiągnięcie Habilitanta i jego współpracowników.

W kolejnych dwóch pracach H2 i H3 przedstawiono badania dwóch sond fluorescencyjnych stosowanych w badaniach kwasów nukleinowych. Pierwszym z nich była 8-vinyloguanina (8vG) – izomorficzny analog guaniny, w którym obecność grupy winylowej w pozycji 8 powoduje wzrost wydajności kwantowej fluorescencji o trzy rzędy wielkości w porównaniu do guaniny. W pracy H2 pokazano, że stanem odpowiedzialnym za fluorescencję tego związku jest stan  $S_1$ , w którym zachodzi wewnętrzne przeniesienie ładunku na grupę winylową. Wskazano również dwa mechanizmy (konwersji wewnętrznej i przejścia międzysystemowego) prowadzące do deaktywacji bezpromienistej tego związku oraz zbadano wpływ polarności rozpuszczalnika na szybkości zachodzenia tych procesów. Warto podkreślić, że główne tezy powyższej pracy zostały niezależnie potwierdzone przez inną grupę badawczą stosującą metodę funkcjonału gęstości elektronowej. W pracy H3 zbadano benzopirydopirymidynę (BPP) – sondę fluorescencyjną potrafiącą utworzyć układy wiązań

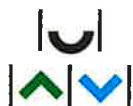


wodorowych typu Watsona-Cricka zarówno z guaniną jak również z adeniną, przy czym wydajność fluorescencji tego związku zależy od partnera, z którym on oddziałuje. Pokazano, że mechanizm wygaszania fluorescencji polegający na fotoindukowanym przeniesieniu elektronu, po którym może również nastąpić przeniesienie protonu zachodzi dla pary BPP-G, natomiast nie zachodzi dla pary BPP-A, tłumacząc w ten sposób bardziej efektywne gaszenie fluorescencji w układzie BPP-G.

Pozostałe trzy prace cyklu habilitacyjnego koncentrują się na opisie mechanizmów fotoizomeryzacji wybranych związków. W pracy H5 autorzy przy pomocy symulacji NAMD pokazują dwa możliwe mechanizmy podwójnego przeniesienia protonu w fotoindukowanej reakcji glikosalu z metanolem, w której powstaje cząsteczka hydroksyketenu. Pierwsza z zaproponowanych ścieżek reakcji zaczynająca się w stanie  $S_1$  i przechodząca przez przecięcie stożkowe ze stanem  $S_0$  odkryta została przez Habilitanta. W pracy zastosowano nowatorskie połączenie metody NAMD z metodą TDDFT w wersji z inwersją spinu (SFTDDFT).

W pracy H6 zbadano mechanizm fotoizomeryzacji cząsteczek all-trans-retinyłu. Wyjaśnienie przebiegu tej reakcji jest istotne ze względu na możliwość jej optymalizacji w kierunku otrzymania jednego z jej produktów mogącego mieć zastosowanie w leczeniu chorób oka. Obliczenia przeprowadzone w pracy pozwoliły na wyeliminowanie dwóch z trzech zaproponowanych wcześniej przez inne zespoły badawcze mechanizmów fotoizomeryzacji tego związku, jednoznacznie wskazując na mechanizm zachodzący ze zginaniem łańcucha polienowego. Konieczność uwzględnienia stanów podwójnie wzbudzonych wymusiła na badaczach zastosowanie bardzo kosztownej metody obliczeniowej (XMS-CASPT2), co w konsekwencji uniemożliwiło badanie dynamiki układu za pomocą metody NAMD i dlatego ograniczono się do optymalizacji geometrii i skanów powierzchni energii potencjalnej.

W ostatniej pracy cyklu H8 autorzy zajmują się badaniem fotochemii furylfulgidów, związków fotochromowych mających potencjalne zastosowanie w urządzeniach pamięci optycznej oraz w materiałach fotomechanicznych. Ponownie zastosowanie metody NAMD do badania tych związków pozwoliło na wyjaśnienie pewnych kwestii spornych dotyczących mechanizmu ich fotoizomeryzacji. Autorzy wykazali, że reakcje fotoizomeryzacji zachodzą w skali czasowej femtosekund i podczas tego procesu nie powstają żadne produkty pośrednie o



UNIWERSYTET  
WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE

dr hab. **Maciej Maciejczyk**, prof. UWM

Katedra Fizyki i Biofizyki

długim czasie życia. Obliczono również wydajności kwantowe fotoizomeryzacji związku otrzymując bardzo dobrą zgodność z wynikami doświadczalnymi.

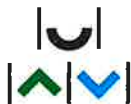
W mojej opinii przedstawione w osiągnięciu naukowym wyniki tworzą całościowy, spójny obraz fotochemii i fotofizyki badanych związków, który w wielu przypadkach umożliwia weryfikacje hipotez stawianych przez inne zespoły badawcze zajmujące się tą tematyką lub postuluje własne mechanizmy zachodzenia wybranych procesów i dlatego z całą pewnością posiada elementy nowości naukowej. Warto podkreślić przy tym, że dr Kochman odegrał pierwszoplanową rolę w każdej z publikacji cyklu habilitacyjnego. Dlatego uważam, że przedstawione osiągnięcie naukowe stanowi znaczny wkład Habilitanta w rozwój dyscypliny nauki chemiczne.

### **Dorobek naukowy**

Pan dr Michał Andrzej Kochman całą swoją dotychczasową karierę naukową poświęcił zastosowaniu metod chemii kwantowej do badań własności różnego rodzaju związków chemicznych z naciskiem na badania ich fotofizyki oraz fotochemii. Analiza dorobku publikacyjnego dr Kochmana wskazuje na bardzo dobre opanowanie i zrozumienie przez niego szybko rozwijających się metod chemii kwantowej. Warto podkreślić dużą samodzielność Habilitanta, jak również umiejętność tworzenia własnego warsztatu badawczego w postaci programowych nakładek na istniejące oprogramowanie (tj. Turbomole czy Q-Chem) pozwalających na obliczanie żądanych własności fizykochemicznych badanych układów molekularnych w sposób zautomatyzowany oraz umiejętność konfiguracji i administracji serwerów obliczeniowych.

Całkowity dorobek naukowy Kandydata do stopnia doktora habilitowanego jest na bardzo dobrym poziomie i w mojej ocenie spełnia wymagania stawiane obecnie kandydatom do stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne. Pan dr Kochman jest współautorem 28 artykułów opublikowanych w prestiżowych pismach z listy JCR, które jak dotąd cytowane były 419 razy (400 razy bez autocytowań), a jego aktualny współczynnik Hirsha wynosi 11. Imponująco wygląda, wynoszący niemal 150, całkowity współczynnik oddziaływania wszystkich publikacji dr Kochmana. Dodatkowo Habilitant prezentował wyniki swoich badań podczas konferencji

UNIWERSYTET WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE  
Katedra Fizyki i Biofizyki  
ul. Michała Oczapowskiego 4, 10-718 Olsztyn  
tel. (89) 523 32 34    maciej.maciejczyk@uwm.edu.pl  
fax (89) 523 38 61    www.uwm.edu.pl/wnz/node/508



UNIWERSYTET  
WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE

dr hab. **Maciej Maciejczyk**, prof. UWM

Katedra Fizyki i Biofizyki

naukowych 9 razy w formie plakatu i 6 razy w formie wykładu, przy czym w trzech przypadkach były to wykłady na zaproszenie. Wszystkie wykłady wygłoszone zostały w języku angielskim. Ponadto Habilitant wykazał się umiejętnością pozyskiwania środków na badania, gdyż jest autorem trzech projektów badawczych (dwóch zrealizowanych – Miniatura 6 i PD2PI oraz jednego w trakcie realizacji – stypendium Humboldta) oraz współpracownikiem zewnętrznym w trwającym aktualnie projekcie Opus 23 NCN. Habilitant jest również autorem 6-ciu recenzji wykonanych w latach 2015-2023 dla czasopism naukowych o zasięgu międzynarodowym.

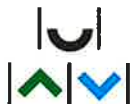
Na szczególną uwagę zasługuje udział dr Kochmana w stażach naukowych. Przed uzyskaniem stopnia doktora Habilitant odbył dwa krótkie staże naukowe, a po jego otrzymaniu trzy staże podoktorskie w wiodących europejskich instytucjach naukowych – Instytucie Maksa Plancka ds. Struktury i Dynamiki Materii w Hamburgu, na Uniwersytecie w Linköping oraz University College London. Wydaje mi się, że w połączeniu z faktem uzyskania przez Habilitanta tytułu doktora na Uniwersytecie Edynburskim, świadczy to bardzo dobrze o jego umiejętności pracy w międzynarodowym środowisku naukowym.

Podsumowując, przedstawiony do oceny przez dr Michała Andrzeja Kochmana dorobek naukowy spełnia zwyczajowe kryteria dla osoby ubiegającej się o stopień naukowy doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

### **Dorobek dydaktyczny i organizacyjny**

Biorąc pod uwagę ilość czasu spędzonego przez Kandydata na stażach podoktorskich oraz zatrudnienie głównie w instytutach naukowych, jego dorobek dydaktyczny należy ocenić pozytywnie. W czasie studiów doktoranckich Habilitant pełnił funkcję asystenta w laboratorium chemii fizycznej oraz prowadził kurs z podstaw chemii kwantowej i użytkowania programu Gaussian. W pierwszym semestrze bieżącego roku akademickiego prowadził indywidualny kurs dla studenta na MISMaP UW pod nazwą Laboratorium Fizyki 2 poziom A1. Ponadto dr Kochman sprawował opiekę naukową nad dwójką doktorantów z Wydziału Fizyki Uniwersytetu w Hamburgu, z którymi ma wspólne publikacje. Habilitant był również członkiem komitetu organizacyjnego konferencji o zasięgu międzynarodowym oraz komisji rekrutacyjnej ds. naboru na stanowisko studenta-stypendysty w IChF PAN.

UNIWERSYTET WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE  
Katedra Fizyki i Biofizyki  
ul. Michała Oczapowskiego 4, 10-718 Olsztyn  
tel. (89) 523 32 34    maciej.maciejczyk@uwm.edu.pl  
fax (89) 523 38 61    www.uwm.edu.pl/wnz/node/508



UNIWERSYTET  
WARMIŃSKO-MAZURSKI W OLSZTYNIE

dr hab. **Maciej Maciejczyk**, prof. UWM

Katedra Fizyki i Biofizyki

---

## Konkuzja

W podsumowaniu uważam, że dr Michał Andrzej Kochman posiada wysokie kwalifikacje naukowe, dobrze ustalone zainteresowania i ścieżkę badawczą potwierdzoną przez publikacje naukowe oraz cytowania jego prac. Prowadzi aktywną współpracę na forum zarówno krajowym jak również międzynarodowym oraz pokazał, że potrafi pozyskiwać środki na swoje badania. Pozytywnie również należy ocenić jego działalność dydaktyczną i organizacyjną. Na podstawie przedstawionego mi do oceny dorobku dr Michała Andrzeja Kochmana uważam, że całościowo można go ocenić jako bardzo dobry i w mojej ocenie wystarczający dla osoby ubiegającej się o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

Wnioskuje zatem do Rady Naukowej Instytutu Chemii Fizycznej PAN o nadanie Panu dr Michałowi Andrzejowi Kochmanowi stopnia doktora habilitowanego.

dr hab. Maciej Maciejczyk, prof. UWM

