



UNIwersytet
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Prof. dr hab. Artur Michałak
Zakład Chemii Teoretycznej
Wydział Chemii
Uniwersytet Jagielloński
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
tel. +48-12-686-2381
fax. +48-12-686-2750
e-mail: michalak@chemia.uj.edu.pl

Kraków, 28 lipca 2024 r.

Wydział Chemii

Ocena dorobku naukowego dr. Michała Andrzeja Kochmana oraz jego osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego, przedstawionego pod tytułem

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

Dr Michał Andrzej Kochman ukończył studia magisterskie na Uniwersytecie Edynburskim (College of Science and Engineering) w 2010 r., uzyskując tytuł magistra z wyróżnieniem (Master of Chemistry with First Class Honour). W tej samej instytucji uzyskał stopień naukowy doktora w 2014 r. w oparciu o rozprawę zatytułowaną „*Ab initio simulations of reactions occurring in molecular crystals*”, której promotorem był prof. dr Carole A. Morrison (Wydział Chemii), a promotorem pomocniczym prof. dr Benedict Leimkuhler (Wydział Matematyki). Bogata kariera zawodowa i naukowa po zakończeniu doktoratu przebiegała wzorcową ścieżką, na której wystąpiło kilka długoterminowych staży podoktorskich w różnych krajach i instytucjach. I tak, w l. 2013-2018 dr Michał Kochman pracował w Instytucie Maxa Plancka w Hamburgu (MPSD) w grupie prof. dra R.J. Dwayna Millera, (w l. 2013-2017 jako postdoc, a następnie w l. 2017-2018 jako kierownik grupy teoretycznej), w l. 2017-2018 pracował

ul. Gronostajowa 2
30-387 Kraków
tel. +48 12 686 26 00
fax +48 12 686 27 50
sekretar@chemia.uj.edu.pl
www.chemia.uj.edu.pl

na Uniwersytecie w Linkoping w Szwecji (Wydział Fizyki Chemii i Biologii) w grupie prof. Bo Durbeeja, a w l. 2019-2020 – w University College London (Wydział Chemii), w zespole prof. dra Martijna A Zwijnenburga. Od 2020 r. Kandydat zatrudniony jest jako adiunkt w Instytucie Chemii Fizycznej PAN w zespole prof. Adama Kubasa.

Ponieważ wszystkie etapy zatrudnienia oraz staże krajowe i zagraniczne związane były z działalnością naukową, której wynikiem było powstanie wielu publikacji naukowych, można uznać, że przesłanka ustawową zawartą w art. 219 ust. 1 pkt. 3 związana z „istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury” w przypadku dra Michała Kochmana spełniona jest z nawiązką.

Osiągnięcie habilitacyjne dra Michała Kochmana, zatytułowane „*Symulacje komputerowe dynamiki stanów wzbudzonych. Mechanizmy fotorelaksacji, oddziaływania międzycząsteczkowe, i widma czasowo-rozdzielcze*”, stanowi spójny tematycznie cykl 8 publikacji naukowych opublikowanych w latach 2015-2022 w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym: *Journal of Chemical Theory and Computation* (2 prace), *Journal of Physical Chemistry A* (5 prac), oraz *Physical Chemistry Chemical Physics*. W przedłożonym Autoreferacie osiągnięcie habilitacyjne zostało podsumowane obszernym, bardzo dobrze napisanym, 61-stronicowym komentarzem (z listą bibliograficzną liczącą 163 pozycje literaturowe).

Wszystkie publikacje cyklu habilitacyjnego to prace wieloautorskie (2-4 autorów), we wszystkich publikacjach poza jedną Habilitant jest pierwszym autorem, a we wszystkich autorem (lub jednym z autorów) korespondencyjnym. Przedłożona dokumentacja zawiera oświadczenia Habilitanta oraz współautorów dotyczące ich wkładu prace cyklu habilitacyjnego. Oświadczenia te zdecydowanie pozwalają zidentyfikować wkład Habilitanta we wszystkich publikacjach jako znaczący i dominujący.

Badania Habilitanta dotyczą zastosowań metod teoretycznych *state-of-the-art*. w szczegółowym opisie mechanizmów procesów fotochemicznych/fotochemicznych. Głównym narzędziem Habilitanta jest metoda symulacji nieadiabaticznej dynamiki molekularnej (NAMD) zastosowanej w połączeniu z różnymi zaawansowanymi metodami wyznaczania struktury elektronowej (SF-TDDFT, CC2, EOM-CCSD, ADC(2)).

Publikacje cyklu prezentującego osiągnięcie habilitacyjne dotyczą dwóch grup zagadnień, tj. **szczegółowego opisu fotofizyki sond fluorescencyjnych (prace H1, H2, H3, H4, H7)** oraz **szczegółowego opisu mechanizmów reakcji fotoizomeryzacji (publikacje H5, H6, H8)**. Prace **H1, H4 i H7** dotyczą opisu fotofizyki *p*-(N,N-dimetyloamino) cyjanobenzenu (DMABN); najważniejsze osiągnięcia w tym zakresie obejmują szczegółowe wyjaśnienie przebiegu fotorelaksacji i podwójnej fluorescencji DMABN (**H1**), opis fotorelaksacji DMABN w rozpuszczalniku polarnym w oparciu o symulacje NAMD w podejściu QM/MM oraz uwzględnienie polaryzacji cząsteczki DMABN przez cząsteczki wody modelowane za pomocą ładunków punktowych (*electrostatic embedding*; praca **H4**), oraz wyjaśnienie struktury widm absorpcji przejściowej (praca **H7**). Publikacje **H2 i H3** dotyczą szczegółowego fotofizyki 8-winyloguaniny (8vG) oraz beznopirylopirydyny (BPP). Główne osiągnięcia prezentowane w pierwszej z tych prac dotyczą wyjaśnienia pochodzenia oraz wygaszania fluorescencji 8vG, a w drugiej – wyjaśnienie mechanizmu rozróżniania zasad nukleinowych przez BPP poprzez proces fotoindukowanego przeniesienia elektronu. W pracach z drugiej grupy przedstawione są wyniki badań fotoizomeryzacji w kompleksie gliksal-metanol (**H5**), fotoizomeryzacji octanu all-*trans*-retinyłu (**H6**) oraz fotofizyki furylfulgidów (**H8**). W szczególności, bardzo ważnym osiągnięciem pracy **H5** (z udziałem prof. A. Bila) jest odkrycie dwóch nieznanych dotąd ścieżek reakcji, prowadzące do weryfikacji uznawanego dotąd mechanizmu fotoizomeryzacji kompleksu gliksal-metanol. Warto zauważyć, że **najbardziej cytowanymi publikacjami z cyklu habilitacyjnego są prace H1 (26 cytowań), H4 (14 cytowań) oraz H2 (13 cytowań)**.

Znaczącym elementem osiągnięcia habilitacyjnego dr. Michała Kochmana jest także jego wkład metodologiczny. Duża część przeprowadzonych symulacji oraz zaprezentowana analiza ich wyników była możliwa dzięki oryginalnego oprogramowania rozwijanego przez Habilitanta; w ramach prowadzonych badań powstała obszerna biblioteka programów do modelowania dynamiki stanów wzbudzonych oraz wyznaczania widm czasowo-rozdzielczych. W szczególności, Habilitant opracował własną implementację metody NAMD w ujęciu hybrydowym QM/MM, która ma postać „nakładki” współpracującej z kilkoma znanymi programami do obliczeń struktury elektronowej (Turbomole, QChem, BAGEL). **Oprogramowanie opracowane przez Habilitanta zawiera szereg nowatorskich, oryginalnych algorytmów i rozwiązań,** opisanych w Autoreferacie przy opisie poszczególnych publikacji cyklu Habilitacyjnego.

Podsumowany w dokumentacji całkowity dorobek naukowy dra Michała Kochmana obejmuje 28 publikacji naukowych, z których 6 zostało opublikowanych przed doktoratem; zatem poza publikacjami wchodzącymi w skład cyklu habilitacyjnego, dorobek naukowy Habilitanta obejmuje jeszcze 14 innych prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora. Łączna wartość współczynnika oddziaływania (*Impact factor*) prac Habilitanta po doktoracie przekracza 100. Biorąc pod uwagę liczbę publikacji i rangę czasopism, całkowity dorobek Habilitanta uważam za bardzo dobry, na etapie habilitacji.

Wyniki badań naukowych prowadzonych przez dra Michała Kochmana znajdują oddźwięk w literaturze. Zgodnie z dokumentacją, łączna liczba cytowań (wg. bazy Web of Science) wynosi 362, a indeks Hirscha wynosi 10. Biorąc pod uwagę specyfikę tematyki badawczej Habilitanta są to liczby znaczące.

Dorobek naukowy dra Michała Kochmana obejmuje także współautorstwo wystąpień konferencyjnych oraz wykłady w instytucjach naukowych, choć jest ich zaskakująco niewiele; w dokumentacji wymieniono 15 wystąpień, z których 8 dotyczy konferencji naukowych; większość wystąpień konferencyjnych to prezentacje posterowe, choć lista obejmuje dwa wykłady plenarne (w 2013 i 2015 r.).

Z uznaniem należy odnotować fakt kierowania projektami badawczymi OPUS (2023-2027) oraz projektem w ramach Stypendium Badawczego Humboldta dla Doświadczonych Naukowców (2024-2025). Habilitant wcześniej kierował także projektami NCN MINIATURA oraz projektem PD2PI w IChF PAN.

Pewnym potwierdzeniem rozpoznawalności naukowej Habilitanta są recenzje artykułów dla czasopism naukowych - Habilitant wymienia 6 recenzji, wykonanych dla pięciu czasopism - choć w okresie 9 lat (2015-2023) jest to liczba raczej niewielka.

Dorobek dydaktyczny dra Michała Kochmana jest ubogi, co wynika z naukowego charakteru etatów na których był zatrudniany. W trakcie studiów doktoranckich prowadził zajęcia w laboratorium chemii fizycznej. W ostatnim okresie zatrudnienia w PAN prowadził kurs z podstaw użytkowania programu Gaussian dla pracowników i doktorantów, a ostatnio indywidualny kurs z laboratorium z fizyki dla studenta MISMaP UW. Najistotniejszym elementem osiągnięć dydaktycznych ważnych u progu pełnej samodzielności oraz uzyskania prawa do prowadzenia doktoratów jest opieka nad studentami i doktoratami. W tym zakresie,

Habilitant sprawował częściowo opiekę nad dwójką doktorantów podczas zatrudnienia w instytucie MPG w Hamburgu (bez formalnego udziału w przewodach doktorskich).

Podsumowując, uważam, że przedstawione jako podstawa osiągnięcia habilitacyjnego prace dra Michała Andrzeja Kochmana stanowią wkład w rozwój nauki. Podobnie należy ocenić jego inne prace opublikowane po doktoracie, które nie zostały umieszczone w cyklu habilitacyjnym. Aktywność naukowa Habilitanta świadczy pozytywnie o jego wysokich kwalifikacjach do samodzielnej pracy naukowo-badawczej. W mojej opinii spełnione są wszystkie przesłanki wymienione w Art. 219 aktualnie obowiązującej ustawy, wymagane do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego. Uważam więc także, że **nadanie panu dr. Michałowi Andrzejowi Kochmanowi stopnia doktora habilitowanego jest w pełni uzasadnione.**

Prof. dr hab. Artur Michalak