



**INSTYTUT FIZYKI POLSKIEJ AKADEMII NAUK**  
**INSTITUTE OF PHYSICS, POLISH ACADEMY OF SCIENCES**

02-668 WARSZAWA, Al. LOTNIKÓW 32/46  
fax: (48-22) 843-0926; <http://info.ifpan.edu.pl>

---

Prof. dr hab. Andrzej L. Sobolewski      tel.: +48 22 116 3210  
e-mail: [sobola@ifpan.edu.pl](mailto:sobola@ifpan.edu.pl)

Warszawa, 23 lipca 2024

**Ocena dorobku naukowego dra Michała Andrzeja Kochmana w związku z  
wnioskiem o nadanie stopnia doktora habilitowanego**

Dr Michał Kochman ukończył Wyższą Szkołę Nauki i Inżynierii Uniwersytetu Edynburskiego w Edynburgu uzyskując w roku 2010 dyplom magistra chemii. Następnie w roku 2014 uzyskał także stopień doktora nauk chemicznych broniąc, napisaną pod kierunkiem prof. dr. Carole A. Morrison oraz promotora pomocniczego prof. dr Benedicta Leimkuhler, pracę zatytułowaną „*Ab initio simulations of reactions occurring in molecular crystals*”.

Po uzyskaniu stopnia doktora nauk dr Kochman odbył w latach 2013-2017 staż podoktorski w zespole badawczym prof. dra R. J. Dwayne'a Millera w Instytucie Maxa Plancka ds. Struktury i Dynamiki Materii (MPSD) w Hamburgu, gdzie w latach 2017-2018 kierował teoretyczną grupą badawczą. W latach 2018-2020 najpierw spędził rok w zespole badawczym prof. dra Bo Durbeeja na Wydziale Fizyki, Chemii, i Biologii, Uniwersytetu w Linköping, Szwecja, a rok następny w zespole badawczym prof. dra Martijna A. Zwijnenburga na Wydziale Chemii, University College of London. W roku 2020 został zatrudniony w zespole badawczym dra hab. Adama Kubasa w Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie.

Ocenę osiągnięcia naukowego dra Michała Kochmana, jego dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego wykonałem w oparciu o przedstawiony przez niego Autoreferat z załączonymi ośmioma publikacjami wchodzącymi w skład osiągnięcia naukowego oraz dane bibliograficzne z bazy Web of Science.

## Omówienie i ocena osiągnięcia habilitacyjnego

Dostarczone mi materiały zawierają wszystkie dokumenty niezbędne do oceny wniosku i przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego. W Autoreferacie omówiono cele prowadzonych badań oraz przedstawiono w zwartej formie najważniejsze wyniki osiągnięcia naukowego. Zgodnie z wymogami Autoreferat zawiera także krótkie omówienie pozostałych publikacji i osiągnięć naukowych będących w dorobku Kandydata do stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Oceniane osiągnięcie habilitacyjne dra Kochmana składa się z 8 prac opublikowanych na przestrzeni lat 2015-2022 w wiodących międzynarodowych czasopismach w dziedzinie chemii fizycznej. Wszystkie prace są współautorskie. Z załączonych oświadczeń współautorów oraz habilitanta wynika, że jego wkład w powstanie tych prac był wiodący. Tytuł osiągnięcia naukowego został sformułowany jako: „*Symulacje komputerowe dynamiki stanów wzbudzonych. Mechanizmy fotorelaksacji, oddziaływania międzycząsteczkowe, i widma czasowo-rozdzielcze*”. Autoreferat w języku polskim i angielskim zawarty w dokumentacji habilitacyjnej podaje streszczenia tych prac i omówienie najważniejszych wyników.

Zrozumienie fotoreaktywności cząsteczek jest kluczowe dla wielu dziedzin nauki i technologii, w tym chemii, fizyki, biologii molekularnej, materiałoznawstwa oraz inżynierii fotowoltaicznej. Dwa główne podejścia teoretyczne do badania tych procesów to kwantowo-chemiczne obliczanie „statycznych” profili energii potencjalnej (PEP) w różnych stanach elektronowych badanej cząsteczki wzdłuż założonych współrzędnych wewnątrzcząsteczkowych lub symulacje dynamiki nieadiabaticznej wzbudzenia elektronowego. Choć obie metody są istotne, symulacje dynamiki nieadiabaticznej oferują jednak głębszy i bardziej kompleksowy wgląd w fotoreaktywność cząsteczek, ponieważ uwzględniają zarówno ruch jąder, jak i elektronów w czasie rzeczywistym, co pozwala na analizę rzeczywistych ścieżek reakcji i przejść między stanami elektronowymi. Co więcej, symulacje dynamiki nieadiabaticznej pozwalają na odkrycie nowych, nieoczywistych ścieżek reakcji, które mogą być przeoczone w analizach opartych wyłącznie na statycznych profilach energii potencjalnej. Naukowy środek ciężkości serii omawianych prac skupiony jest wokół tej drugiej (dynamicznej) metody (prace H1, H4, H5, H7, H8), ale również fotofizyka części wybranych układów molekularnych jest dyskutowana w oparciu o wyznaczone „statyczne” profile energii potencjalnej (prace H2, H3, H6).

Podstawowym dylematem, z którym musiał zmierzyć się autor omawianych prac

było uzyskanie zadawalającego kompromisu pomiędzy kosztownością dynamicznych obliczeń kwantowo-chemicznych, a ich precyzją w odtwarzaniu wielkości mierzonych doświadczalnie, co stanowi ogromne wyzwanie w tej dziedzinie badań. W swoich pracach dr Kochman zaadoptował istniejące metody symulacji nieadiabaticznej dynamiki molekularnej (NAMD) wprowadzając szereg istotnych innowacji zarówno w dziedzinie metodologii obliczeniowej jak również do analizy otrzymanych wyników.

Omawianie wyników uzyskanych w serii prac H1-H8 autor poprzedza obszernym i szczegółowym wprowadzeniem do metodologii obliczeń dotyczących zarówno symulacji NAMD jak również obliczenia na tej podstawie czasowo-rozdzielczych widm molekularnych. Większość zagadnień badawczych przedstawionych w przedłożonych pracach dotyczy rozwiązywania konkretnych i starannie wybranych problemów naukowych związanych z nietrywialną interpretacją wyników doświadczalnych, a uzyskane wyniki mogą stanowić nowe standardy i inspirować nowe kierunki badań w tej dziedzinie.

W pierwszej z serii prac [H1] habilitant badał zjawisko podwójnej fluorescencji w cząsteczce DMABN. Jest to o tyle ciekawe, że historycznie pierwsza interpretacja tego zjawiska znana powszechnie pod nazwą TICT (*ang. twisted intramolecular charge transfer*) została zaproponowana w roku 1983 przez prof. Zbigniewa Grabowskiego i dra Jacka Dobkowskiego, pracowników IChF PAN. Szkoda, że ta pionierska praca nie została zacytowana w Autoreferacie. Praca ta zapoczątkowała, trwającą do dziś, istną lawinę badań i różnorodnych interpretacji tego zjawiska. W pracy H1 oraz w późniejszych publikacjach H4 i H7, dr Kochman w sposób jednoznaczny potwierdził słuszność tej historycznej interpretacji, a przeprowadzone symulacje dynamiki pozwoliły na wyznaczenie bardzo szczegółowego mechanizmu tego zjawiska.

Praca H2 została poświęcona zbadaniu fotofizyki jednego z bardziej popularnych tzw. znaczników fluorescencyjnych do badania kwasów nukleinowych, 8-vinyloguaniny (8vG). O ile natywne zasady DNA i RNA wykazują b. słabą, lub żadną fluorescencję, to wydajność kwantowa fluorescencji 8vG jest o 3 rzędy wielkości wyższa niż guaniny. Policzone w pracy H2 profile energii potencjalnej w stanie  $S_1$  tej cząsteczki wykazały, że jej stan fluoryzujący na naturę ICT (*ang. Intramolecular charge-transfer*) i jest „zabezpieczony” od stanu ulegającemu dezaktywacji bezpromienistej barierą potencjału. Co więcej, forma nieświecąca tej cząsteczki przyjmuje w stanie  $S_1$  konformacje typu „*ring-puckering*” typową dla natiwnych zasad nukleinowych. Jest to powszechnie akceptowany mechanizm dezaktywacji bezpromienistej zasad nukleinowych i szkoda, że nie został odnotowany w

Autoreferacie.

W pracy H3 zbadano fotofizykę innego znacznika tego typu, benzopirydopirymidyny (BBP), która tworzy związane wodorowo pary „komplementarne” zarówno z adeniną (BBP-A), jak i guaniną (BBP-G). Znaczne wygaszenie fluorescencji kompleksu PPB-G w stosunku do PPB-A pozwala na stosunkowo łatwe spektroskopowe rozróżnienie tych kompleksów. Przeprowadzone w pracy H3 obliczenia kwantowo-chemiczne wykazały, że za wygaszenie fluorescencji kompleksu z guanina odpowiada występujące tam zjawisko elektronowo-indukowanego przeniesienia protonu (EDPT), które nie zachodzi w kompleksie z adeniną. Wyjaśniono to różnicą w potencjale jonizacji guaniny w stosunku do adeniny. Jest to bardzo znaczący wynik, ale zapewne warto by było wspomnieć w tym kontekście o pionierskich pracach, które wprowadziły mechanizm EDPT badając fotofizykę ‘natywnych’ par G-C, A-T oraz ich analogów.

W pracy H5 zbadano przy pomocy dynamiki NAMD mechanizm fotoindukowanej wymiany protonów w związanym wodorowo kompleksie glioksalu z metanolem. Godnym uwagi wynikiem tej pracy jest wykazanie dwutorowości tej reakcji, która może zachodzić zarówno w stanie  $S_1$ , jak również w stanie  $T_1$ . Przy czym, o ile reakcja pierwsza ulega bifurkacji w pobliżu „przecięcia stożkowego” stanu  $S_1$  ze stanem  $S_0$ , to reakcja z stanie trypletowym przebiega jednotorowo ze względu na znikomo mały element sprzężenia spin-orbita. Godnym podkreślenia jest innowacyjne zastosowanie w symulacjach NAMD metody spin-flip-TDFT przy użyciu algorytmu nienadzorowanego.

Praca H6 została poświęcona zbadaniu złożonej fotoizomeryzacji all-trans-retinyli. Podobnie jak wspomniana uprzednio cząsteczka DMABN, fotoizomeryzacja all-trans-retinyli jest badana od lat i mechanizmy tej reakcji są przedmiotem intensywnej dyskusji naukowej. Znaczne rozmiary cząsteczki i obecność stanów podwójnie wzbudzonych wymogły konieczność zastosowania wielokonfiguracyjnej metody struktury elektronowej oraz badania „okrojonego” układu modelowego. Przeprowadzone obszerne badania profili energii potencjalnej w stanach wzbudzonych cząsteczki i topografii przecięć stożkowych doprowadziły do wniosku, że najbardziej prawdopodobnym mechanizmem fotoizomeryzacji tej cząsteczki jest zginanie łańcucha bez udziału proponowanych wcześniej pośrednich form zwitterionowych czy mechanizmu typu *one-bond flip*. Jest to ciekawy wynik, chociaż brakuje mi analizy zmiany długości wiązań pomiędzy uczestniczącymi w tej reakcji atomami węgla, co daje na ogół znaczący wkład energetyczny do fotoizomeryzacji wiązań podwójnych.

Praca H8, prezentująca wyniki badań fotofizyki fotochromowego furylfulgidu, stanowi w pewnym sensie ukoronowanie omawianej serii prac. Fotofizyka tej cząsteczki jest badana od lat, ale nadal jest przedmiotem licznych kontrowersji. Przeprowadzone dla reprezentatywnych jej izomerów  $E_\alpha$  i  $E_\beta$  symulacje NADM wykazały wielowymiarowość zachodzących procesów fotofizycznych. W celu interpretacji uzyskanych wyników habilitant zastosował nowatorską metodę analizy trajektorii NADM przy użyciu algorytmu uczenia nienadzorowanego, co pozwoliło na uzyskanie b. szczegółowego obrazu złożonego procesu relaksacji badanych izomerów.

Należy podkreślić, że zaprezentowany jako osiągnięcie habilitacyjne cykl prac stanowi realizację dobrze zdefiniowanego i spójnego projektu badawczego, który stanowi istotny wkład do modelowania nieadiabaticznej dynamiki molekularnej w zastosowaniu do opisu złożonej fotofizyki cząsteczek wieloatomowych oraz wpływu otoczenia na te procesy. Ważnym osiągnięciem metodologicznym habilitanta było utworzenie biblioteki programów do modelowania komputerowego dynamiki stanów wzbudzonych i widm czasowo-rozdzielczych. Autoreferat został poprawnie zredagowany i najważniejsze aspekty omawianego cyklu prac oraz ich wzajemne powiązania zostały przedstawione w sposób klarowny.

#### Ocena pozostałego dorobku naukowego

Na pozostały dorobek naukowy dra Kochmana przed uzyskaniem przez niego stopnia doktorskiego składa się 6 prac, a 28 prac zostało opublikowanych po uzyskaniu tego stopnia. Prace te zostały opublikowane w bardzo dobrych czasopismach międzynarodowych. Większość opublikowanych prac współautorstwa habilitanta dotyczą tematyki zapoczątkowanej w jego rozprawie doktorskiej i stanowiącej podstawę jego osiągnięcia habilitacyjnego. Wg bazy Web of Science prace te były cytowane 362 razy, a jego H-index wynosi 10.

Habilitant wygłosił 12 prezentacji oralnych i plakatowych na konferencjach krajowych i międzynarodowych, w tym 2 wykłady plenarne. Poza tym wygłosił 3 zaproszone wykłady seminaryjne.

#### Ocena innej działalności naukowej

Dr Kochman posiada doświadczenie w pozyskiwaniu środków na badania naukowe i w kierowaniu projektami badawczymi. Był kierownikiem projektu

badawczego Miniatura 6, stypendystą typu PostDoc w programie ERA oraz jest wykonawcą w projekcie OPUS 23, a w tym roku uzyskał bardzo prestiżowe Stypendium Badawcze Humboldta dla Doświadczonych Naukowców

Dr Kochman podczas zatrudnienia w Instytucie Maksa Plancka ds. Struktury i Dynamiki Materii (MPSD) w Hamburgu służył opieką naukową dwojgu doktorantom. W roku 2012 opiekował się stażystą w IChF PAN. Pracował jako asystent w laboratorium chemii fizycznej Uniwersytetu Edynburskiego oraz prowadził tamże kurs z podstaw użytkowania programu Gaussian dla zainteresowanych pracowników Wydziału Chemii. W okresie 11.2023-01.2024 prowadził 45-godzinny kurs Laboratorium Fizyki na mocy umowy z MISMaP UW. Habilitant był członkiem lokalnego komitetu organizacyjnego konferencji 6th Quantum Bio-Inorganic Chemistry Conference (QBIC-VI), IChF PAN.

#### Podsumowanie

Podsumowując uważam, że zarówno osiągnięcia naukowe przedstawione jako podstawa habilitacji dra Michała Kochmana jak i jego pozostałe dokonania naukowe i dydaktyczne wypełniają ustawowe i zwyczajowe wymagania dotyczące habilitacji i w pełni uzasadniają nadanie mu stopnia doktora habilitowanego.



Andrzej Sobolewski