

Prof. dr hab. CEZARY CZAPLEWSKI

12.07.2024

Recenzja osiągnięcia naukowego:

cyklu powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zatytułowanego
„Symulacje komputerowe dynamiki stanów wzbudzonych. Mechanizmy fotorelaksacji,
oddziaływania międzycząsteczkowe, i widma czasowo-rozdzielcze”
oraz działalności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej
dr Michała Kochmana

w związku z postępowaniem o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego

Dr Michał Kochman w 2010 roku uzyskał tytuł magistra chemii z wyróżnieniem w College of Science and Engineering, The University of Edinburgh w Edynburgu w Wielkiej Brytanii. Następnie rozpoczął studia doktoranckie na tej samej uczelni. W roku 2014 obronił na tym samym Wydziale rozprawę doktorską pt. „Ab initio simulations of reactions occurring in molecular crystals”, której promotorem była prof. dr Carole A. Morrison z Wydziału Chemii, Uniwersytetu Edynburskiego a promotorem pomocniczym prof. dr Benedict Leimkuhler z Wydział Matematyki, Uniwersytetu Edynburskiego. W latach 2013-2017 dr Michał Kochman odbył staż podoktorski w zespole badawczym prof. dra R. J. Dwayne'a Millera w Instytucie Maksa Plancka ds. Struktury i Dynamiki Materii (MPSD), Hamburg, Niemcy. Następnie w latach 2017-2018 pełnił w tym zespole badawczym funkcję kierownika grupy teoretycznej. Kolejne dwa staże podoktorskie odbył w zespole badawczym prof. dra Bo Durbeeja, na Wydziale Fizyki, Chemii, i Biologii Uniwersytetu w Linköping, Linköping w Szwecji oraz w zespole badawczym prof. dra Martijna A. Zwijnenburga na Wydziale Chemii University College London (UCL) w Londynie w Wielkiej Brytanii, odpowiednio w latach 2018-2019 i 2019-2020. Od 2020 roku jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w zespole badawczym dra hab. Adama Kubasa w Instytucie Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk (IChF PAN) w Warszawie.

Dr Michał Kochman od początku swojej kariery naukowej prowadzi badania teoretyczne z wykorzystaniem metod chemii kwantowej, zarówno w celu analizy danych doświadczalnych jak i aby uzyskać informacje trudno dostępne dla doświadczeń. Tematyka badań przedstawionych jako osiągnięcie naukowe skupia się na badaniach obliczeniowych szeregu wybranych związków

organicznych, których procesy relaksacji nie zostały wyjaśnione w zadowalającym stopniu. Celem jaki postawił sobie habilitant było wyjaśnienie własności optycznych i elektronowych badanych związków oraz skonstruowanie szczegółowych modeli ich procesów relaksacji zapoczątkowanych przez absorpcję światła. Cel ten został osiągnięty poprzez analizę widm wzbudzeń elektronowych i powierzchni energii potencjalnej stanów wzbudzonych, symulację procesu relaksacji zapoczątkowanego przez fotoekscytację, obliczenia widm cząsteczkowych różnych typów, i interpretację dostępnych w literaturze danych spektroskopowych w świetle wyników symulacji.

Dorobek naukowy dr Michała Kochmana obejmuje łącznie 28 publikacji, wszystkie w czasopiśmie z listy JCR, w tym 22 po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych. Ponadto dr Michał Kochman jest współautorem 15 prezentacji na konferencjach międzynarodowych, w tym dwóch wykładów plenarnych i trzech wykładów na zaproszenie. Sumaryczny współczynnik oddziaływania czasopism, w których były publikowane prace dra Michała Kochmana wynosi 148,881 (28,959 dla publikacji z cyklu habilitacyjnego). Publikacje dra Michała Kochmana były cytowane 362 razy według bazy Web of Science (343 bez autocytowań). Indeks Hirscha wyznaczony na podstawie cytowań publikacji dra Michała Kochmana wynosi 10.

Cykl prac stanowiących podstawę postępowania habilitacyjnego składa się z 8 publikacji, które ukazały się w czasopiśmie z listy JCR w latach 2015-2022 (dwie prace w *Journal of Chemical Theory and Computation*, IF=6.006, pięć prac w *The Journal of Physical Chemistry A*, IF=2.944, oraz jedna w *Physical Chemistry Chemical Physics*, IF=3.3). Prace są wieloautorskie, w załączonych pisemnych oświadczeniach współautorzy wszystkich prac wchodzących w skład osiągnięcia habilitacyjnego określili szczegółowo swój udział. Wszystkie prace mają charakter teoretyczny, w których dr Michał Kochman zaprojektował i przeprowadził obliczenia, interpretował i opracował wyniki, w większości prac przygotował koncepcję badań. W siedmiu publikacjach dr Michał Kochman jest pierwszym autorem, a we wszystkich ośmiu autorem korespondencyjnym, co podkreśla Jego wiodący udział. Cykl prac stanowiących podstawę postępowania habilitacyjnego dotyczy symulacji komputerowych dynamiki stanów wzbudzonych, w szczególności badań mechanizmów fotorelaksacji, oddziaływań międzycząsteczkowych i analizy widm czasowo-rozdzielczych.

W pracy H1 dr Michał Kochman rozpoczął badania nad fotofizyką i podwójną fluorescencją 4-(N,N-dimetylamino)benzoniiru (DMABN) i podobnych związków donorowo-akceptorowych. Określił dynamikę relaksacji tego związku w fazie gazowej po fotoekscytacji do stanu S2 oraz oszacował czas trwania konwersji wewnętrznej ze stanu S2 do stanu S1 i zidentyfikował drgania cząsteczkowych, które powodują zachodzenie tego procesu.

Podstawowym celem pracy H2 było wyjaśnienie mechanizm fluorescencji 8-winyloguaniny w oparciu o topografię powierzchni energii potencjalnej stanu podstawowego i stanów wzbudzonych tej cząsteczki.

W pracy H3 dr Michał Kochman sformułował hipotezę, że mechanizm rozróżniania zasad nukleinowych przez BPP polega na selektywnym procesie fotoindukowanego przeniesienia elektronu (photoinduced electron transfer – PET). Następnie zweryfikował tę hipotezę poprzez obliczenia struktury elektronowej dla cząsteczki BPP i jej par zasad z adeniną i z guaniną.

Praca H4 stanowiła kontynuację wcześniejszych badań fotofizyki DMABN-u. W ramach tej pracy dr Michał Kochman napisał program komputerowy zawierający implementację algorytmu niadiabatycznej dynamiki molekularnej (nonadiabatic molecular dynamics – NAMD) w połączeniu z hybrydową metodą mechanika kwantowa/mechanika molekularna (QM/MM). Przy użyciu stworzonego przez siebie programu, przeprowadził symulacje dynamiki relaksacji DMABN-u w fazie gazowej, i w nanokropki wody, która stanowiła model roztworu DMABN-u w rozpuszczalniku polarnym. Następnie obliczył widmo fluorescencji czasowo-rozdzielczej DMABN-u w oby tych ośrodkach. Przeanalizował wyniki symulacji i powiązał je z dostępnymi w literaturze danymi spektroskopowymi co pozwoliło na skonstruowanie całościowego modelu teoretycznego procesu podwójnej fluorescencji DMABN-u.

W pracy H5 dr Michał Kochman zaproponował użycie metod klasy spin-flip (SF) do uzyskania opisu wzbudzonych stanów elektronowych kompleksu glioksal-metanol, i podał teoretyczne uzasadnienie, dlaczego metody SF podają poprawny opis tego układu. Wykonał także obliczenia statyczne (optymalizacje geometrii i skany powierzchni energii potencjalnej), symulacje NAMD przy użyciu metod SF, i analizę wyników wyżej wymienionych obliczeń. Brał udział w sformułowaniu całościowego mechanizmu reakcji fotoindukowanego podwójnego przeniesienia protonu w kompleksie glioksal-metanol. W szczególności, ustalił mechanizm podwójnego przeniesienia protonu w stanach singletowych (tzn. w stanach S0 i S1).

Praca H6 stanowiła część aplikacji o stypendium „From Postdoc to PI: the future leaders of ERA” (PD2PI). Dr Michał Kochman w publikacji H6 ustalił najważniejsze fakty dotyczące mechanizmu fotoizomeryzacji all-trans-RAc: udowodnił, że fotoizomeryzacja może zachodzić według mechanizmu ze zginaniem łańcucha, oraz że mechanizm ten może wyjaśnić obserwowaną doświadczalnie regioselektywność reakcji. Odrzucił natomiast zaproponowany w literaturze mechanizm z udziałem zwitterjonowego produktu pośredniego jako niezgodny zarówno z danymi spektroskopowymi, jak i z wynikami przeprowadzonych obliczeń. Dr Michał Kochman podał również argumenty przemawiające za tym, że mechanizm typu one-bond flip nie wyjaśnia zadowalająco przebiegu reakcji fotoizomeryzacji.

W pracy H7 dr Michał Kochman kontynuował badania poświęcone fotofizyce DMABN-u. Zaprojektował procedurę obliczania widm absorpcji przejściowej (transient absorption – TA) na podstawie wyników symulacji NAMD, i zaimplementował ją w postaci programu komputerowego. Następnie przy użyciu tego algorytmu obliczył widmo TA DMABN-u w nanokropki acetonitrylu. Przeanalizował symulowane widmo TA, i przypisał pojawiające się w nim sygnały określonym wzbudzeniom elektronowym. Zintegrował wyniki uzyskane w wyżej wymienionych obliczeniach z mechanizmem podwójnej fluorescencji DMABN-u, który sformułowany został we wcześniejszej pracy H4.

W pracy H8 dr Michał Kochman wykonał symulacje NAMD oraz wysunął pomysł wykorzystania algorytmu rozpoznawania wzorców, aby zautomatyzować analizę wyników tych symulacji. Zaprojektował procedurę rozpoznawania wzorców, która wyróżniła główne ścieżki relaksacji badanego furylfulgidu, i podał oszacowanie wydajności kwantowych powstawania poszczególnych fotoproduktów. Zinterpretował wyniki symulacji w świetle dostępnych w literaturze danych spektroskopowych. Ponadto, wykonał serię obliczeń weryfikacyjnych i na ich podstawie ocenił, jak dokładny opis topografii powierzchni energii potencjalnej badanej cząsteczki daje metoda spin-flip time-dependent density functional theory (SF-TDDFT).

Dorobek naukowy dr Michała Kochmana na który składa się 28 publikacji uważam za znaczący. Warto dodać, że szereg innych prac Autora, nie wchodzących w skład osiągnięcia habilitacyjnego, zawiera również bardzo ciekawe i wartościowe wyniki badań teoretycznych, np. obliczenia kwantowomechaniczne właściwości fizykochemicznych emiterów dla organicznych diod elektroluminescencyjnych (OLED-ów). Chciałbym podkreślić wkład habilitanta w rozwój biblioteki programów komputerowych do modelowania dynamiki stanów wzbudzonych.

W zakresie działalności dydaktycznej dr Michał Kochman podczas studiów doktoranckich na Wydziale Chemii Uniwersytetu Edynburskiego pracował jako asystent w laboratorium chemii fizycznej dla studentów trzeciego roku. Na mocy specjalnej umowy z Kolegium Międzywydziałowych Indywidualnych Studiów Matematyczno-Przyrodniczych Uniwersytetu Warszawskiego (MISMąP UW), w okresie od listopada 2023 do stycznia 2024 dr Michał Kochman prowadził kurs Laboratorium Fizyki, 2. poziom A1 dla studenta Tomasza Grybera. Podczas zatrudnienia w Instytucie Maksa Plancka ds. Struktury i Dynamiki Materii (MPSD) w Hamburgu sprawował opiekę naukową nad dwoma doktorantami: Raison Dsouza i Martina Pola.

W ramach działalności organizacyjnej dr Michał Kochman brał udział w komisji rekrutacyjnej ds. naboru na stanowisko studenta-stypendysty w IChF PAN, w roku 2023 był członkiem lokalnego komitetu organizacyjnego konferencji 6th Quantum Bio-Inorganic Chemistry Conference (QBIC-VI), IChF PAN, Warszawa, Polska. Zbudował i skonfigurował prototypowy

klaster obliczeniowy oparty o moduły Raspberry Pi, a następnie skonfigurował klaster obliczeniowego w IChF PAN składający się z czterech serwerów obliczeniowych typu Blade, z których dwa zostały zakupione z budżetu jego stypendium PD2PI.

Dr Michał Kochman otrzymał grant „Piruet w smole. Symulacje wpływu rozpuszczalnika na przebieg fotoizomeryzacji motorów molekularnych” w ramach programu Miniatura6 Narodowego Centrum Nauki (NCN) nr 2022/06/X/ST4/00523 a także stypendium „From Postdoc to PI: the future leaders of ERA (PD2PI)” dla projektu „Teoretyczna optymalizacja reakcji fotoizomeryzacji trans-cis retinoidów”. Jako współpracownik zewnętrzny uczestniczy w granie „Ambipolarne związki poliaromatyczne w kształcie misy, zawierające precyzyjnie zlokalizowane domieszki atomów azotu. Unikatowa klasa wysoce wydajnych emiterów OLED (BOwLEDs)” Opus23 Narodowego Centrum Nauki (NCN) nr 2022/45/B/ST4/00800 pod kierownictwem dra Marcina Lindnera z Instytutu Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk (IChO PAN). W 2024 roku dr Michał Kochman uzyskał prestiżowe Stypendium Badawcze Humboldta dla Doświadczonych Naukowców dla projektu „Hybrydowe Symulacje Widm Absorpcji Przejściowej”.

Podsumowując ocenę osiągnięcia naukowego będącego podstawą ubiegania się o stopień doktora habilitowanego oraz dorobku naukowego dr Michała Kochmana stwierdzam, że recenzowany materiał stanowi istotny wkład w rozwój badań teoretycznych w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne, w szczególności związanych z badaniem dynamiki stanów wzbudzonych.

Dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny oraz poziom osiągnięcia naukowego wnoszący istotne elementy nowości naukowej zaprezentowany przez Habilitanta wskazują, że dr Michał Kochman osiągnął etap dojrzałości naukowej. Dr Michał Kochman wykazał się gruntowną znajomością współczesnych technik obliczeniowych stosowanych w badaniach teoretycznych w naukach chemicznych.

Po wnikliwej ocenie dostarczonych mi materiałów w postępowaniu habilitacyjnym dra Michała Kochmana, a przede wszystkim osiągnięcia naukowego stwierdzam, że spełniają one warunki ustawowe określone w art. 219 ust. 1 pkt 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U. z 2018 r., poz.1668 z późn. zm.) i zwyczajowe oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego. W związku z tym wnioskuję o nadanie dr Michałowi Kochmanowi stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

KIEROWNIK
Pracowni Symulacji Polimerów

prof. dr hab. Cezary Czaplowski

