

AUTOREFERAT

1. Imię i Nazwisko. Michał H. Jamróz, e-mail: micjam@wp.pl

2. Posiadane dyplomy, stopnie naukowe z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania

Stopnie naukowe:

Magister, Uniwersytet Jagielloński, Kraków, 1977

Wydział Mat-Fiz-Chem, specjalność: Fizyka teoretyczna

Doktor nauk technicznych, Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa, 1986

Tytuł rozprawy doktorskiej:

Algorytm rozpoznawania podstruktur w związkach organicznych metodą sztucznej inteligencji, na podstawie widm podczerwieni.

3. Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych.

2014 Zakład C5, Instytut Chemii i Techniki Jądrowej, Warszawa

2013-1990 Zespół Spektroskopii i Modelowania Molekularnego, Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa

1989 Zakład Analityczny, Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa

1988-1979 Zakład Spektroskopii Stosowanej, Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa

1979-1977 Zespół Metod Obliczeniowych, Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa

4. PODSUMOWANIE DOROBKU NAUKOWEGO (według bazy Journal Citation Report):

Sumaryczna liczba publikacji 60

W tym po uzyskaniu stopnia doktora 56

Sumaryczny Impact Factor 122

W tym po uzyskaniu stopnia doktora 117

Sumaryczna liczba cytowań (bez autocytowań) 485

Indeks Hirscha 13

Jednotematyczny cykl publikacji obejmuje 15 prac opublikowanych w czasopismach z bazy Journal Citation Report o sumarycznym IF 37.

Michał Jamróz

5. Wykaz opublikowanych prac naukowych lub twórczych prac zawodowych oraz informacja o osiągnięciach dydaktycznych, współpracy naukowej i popularyzacji nauki

I. Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe, o którym mowa w art. 16 ust. 2 ustawy

A) Tytuł osiągnięcia naukowego: **Analiza PED teoretycznych widm oscylacyjnych za pomocą programu VEDA**

B) Publikacje wchodzące w skład osiągnięcia naukowego:

- H1 M. H. Jamróz (100%), 2013, **Vibrational energy distribution analysis (VEDA): Scopes and limitations**, *Spectrochim Acta A*, 114 (2013) 220–230. Mój wkład w powstanie pracy polegał na opisanu programu VEDA do interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych badanych molekuł, wyjaśnieniu zasad jego działania zilustrowane modelowymi przykładami i przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy wynosi 100 %.
- H2 M.H. Jamróz (80%), J. Cz. Dobrowolski (20%), 2001, **Potential Energy Distribution Analysis (PED) of DFT Calculated IR Spectra of the most Stable Li, Na, Cu(I) Diformate Molecules**, *J. Mol. Struct.*, 565-566(2001)475-480. Mój wkład w powstanie pracy polegał na udoskonalaniu programu VEDA, interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych badanych molekuł, dyskusji i opracowaniu wyników oraz współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 80 %.
- H3 M. H. Jamróz (80%), J. Cz. Dobrowolski (10%), J. E. Rode (5%), M. A. Borowiak (5%), 2002, **Theoretical and Experimental IR Spectra and Stability of Dibenzyl Carbamic Acid Dimer**, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 618(1-2) (2002)101-108. Mój wkład w powstanie pracy polegał na interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych i eksperymentalnych badanych molekuł, dyskusji wyników, udoskonalaniu programu VEDA i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 80 %.
- H4 M. H. Jamróz (70%), J. Cz. Dobrowolski (30%), 2002, **Theoretical IR Spectra and Stability of Carbamic Acid Complexes**, *Vib. Spectry.*, 29(2002)217-221. Mój wkład w powstanie pracy polegał na interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych badanych molekuł, dyskusji wyników udoskonalaniu programu VEDA i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 70 %.
- H5 **M. H. Jamróz (75%), R. Brzozowski (10%), J. Cz. Dobrowolski (15%), 2004, Search for IR spectral features of less-abundant diisopropylnaphthalenes based on comparison of theoretical and experimental spectra**, *Spectrochim. Acta A. Mol. Biomol. Spectr.*, 60(2004)371-375. Mój wkład w powstanie pracy polegał na interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych i eksperymentalnych badanych molekuł, dyskusji wyników, udoskonalaniu programu VEDA i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 75 %.
- H6 J. Cz. Dobrowolski (25%), J. E. Rode (20%), Robert Kołos (20%), M. H. Jamróz (25%), K. Bajdor (5%), A. P. Mazurek (5%), 2005, **Ar-matrix IR Spectra of 5-Halouracils Interpreted by Means of DFT Calculations**, *J. Phys. Chem.*, 109(2005)2167-2182. Mój wkład w powstanie pracy polegał na interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych badanych molekuł, dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 25 %.
- H7 M. H. Jamróz (70%), J. Cz. Dobrowolski (10%), R. Brzozowski (20%), 2006, **Vibrational Modes of 2,6-, 2,7-, and 2,3-Diisopropylnaphthalene. A DFT Study**, *J. Mol. Struct.*,

- 787(2006)172-183. Mój wkład w powstanie pracy polegał na interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych i eksperymentalnych badanych molekuł, dyskusji wyników, udoskonalaniu programu VEDA i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 70 %.
- H8 J. Sadlej (25%), J. Cz. Dobrowolski (25%), J. E. Rode (25%), M. H. Jamróz (25%), 2006, **DFT study of vibrational circular dichroism spectra of D-lactic acid-water complexes**, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 8(2006)101-113. Mój wkład w powstanie pracy polegał na współinterpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych badanych molekuł, dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 25 %.
- H9 J. Cz. Dobrowolski (20%), M. H. Jamróz (20%), R. Kołos (20%), J. E. Rode (20%), J. Sadlej (20%), 2007, **Theoretical prediction and the first IR-matrix observation of several L-cysteine molecule conformers**, *ChemPhysChem.*, 8(2007)1085-1094. Mój wkład w powstanie pracy polegał na współinterpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych badanych molekuł, dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
- H10 J. Sadlej (25%), J. Cz. Dobrowolski (25%), J. E. Rode (25%), M. H. Jamróz (25%), 2007, **Density Functional Theory Study on Vibrational Circular Dichroism as a Tool for Analysis of Intermolecular Systems: (1:1) Cysteine-Water Complex Conformations**, *J. Phys. Chem. A*, 111(2007)10703-10711. Mój wkład w powstanie pracy polegał na interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych badanych molekuł i dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 25 %.
- H11 J. Cz. Dobrowolski (15%), S. Ostrowski (15%), R. Kołos (30%), M. H. Jamróz (40%), 2008, **Ar-Matrix IR Spectra of 2-Propanol and its OD, D7 and D8 Isotopologues**, *Vib. Spec.*, 48(2008)82-91. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych, współudziale w interpretacji widm doświadczalnych i współudziale w przygotowaniu manuskryptu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 40 %.
- H12 J. Cz. Dobrowolski (15%), M. H. Jamróz (30%), R. Kołos (20%), J. E. Rode (15%), J. Sadlej (20%), 2008, **IR low-temperature matrix and *ab initio* study on β -alanine conformers**, *ChemPhysChem.*, 9(2008) 2042-2051. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych, interpretacji widm doświadczalnych i współudziale w przygotowaniu manuskryptu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
- H13 M. H. Jamróz (20%), M. E. Jamróz (20%), J. E. Rode (20%), E. Bednarek (20%), J. Cz. Dobrowolski (20%), 2009, **Interpretation of Vibrational and NMR Spectra of Allyl Acrylate. An Evidence for Several Conformers**, *Vib. Spec.* 50 (2009) 231–244.. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych, interpretacji widm doświadczalnych i współudziale w przygotowaniu manuskryptu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
- H14 J. Cz. Dobrowolski (10%), M. H. Jamróz (25%), Robert Kołos (25%), J. E. Rode (5%), M. K. Cyrański (25%), J. Sadlej (10%), 2010, **IR low-temperature matrix, X-Ray and *ab initio* study on L-isoserine conformations**, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 12(2010) 10818–10830. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie widm teoretycznych, doświadczalnych i współudziale w przygotowaniu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 25 %.
- H15 M. K. Cyrański (10%), M. H. Jamróz (20%), A. Ryguła (10%), J. Cz. Dobrowolski (10%), Ł. Dobrzycki (25%), M. Barańska (25%), 2012, **On Two Alizarin Polymorphs**, *CrystEngComm*, 14(2012)3667-3676. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych, interpretacji widm doświadczalnych i współudziale w przygotowaniu manuskryptu publikacji. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

Michał Jamróz

II. Wykaz innych (niewchodzących w skład osiągnięcia wymienionego w pkt I) opublikowanych prac naukowych oraz wskaźniki dokonań naukowych.

Publikacje naukowe w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JRC)

1. H. Ghalla, N. Issaoui, M. Govindarajan, H.T. Flakus, M.H. Jamróz, B. Oujia, 2014, Spectroscopic and molecular structure investigation of 2-furanacrylic acid monomer and dimer using HF and DFT methods, *J. Mol. Struct.*, 1059 (2014) 132–143 (jeszcze nieuwzględniony w WoS). Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 10 %.
2. S. Ostrowski, M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, 2013, On Stability, Chirality Measures, and Theoretical VCD Spectra of the Heterofullerenes $C_{69}X$ ($X = B, Si, Ge, N, P, As$), *Tetrahedron: Asymmetry*, 24 (2013) 1097–1109. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
3. J. E. Rode, M. H. Jamróz, J. Sadlej, J. Cz. Dobrowolski, 2012, On VCD Chirality Transfer in EDA Complexes. A Prediction for the Quinine•••BF₃ System, *J. Phys. Chem. A*, 116(2012)7916–7926. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
4. M. H. Jamróz, J. E. Rode, S. Ostrowski, P. F. Lipiński, J. Cz. Dobrowolski, 2012, Chirality Measures of alpha-Amino Acids, *J. Chem. Inform. Model.*, 52(2012)1462–1479. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na testowaniu miar chiralności za pomocą napisanego przeze mnie programu komputerowego CHIMEA, rozwoju programu CHIMEA i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 40 %.
5. M. K. Jamróz, M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, J. A. Gliński, M. Gleńsk, 2012, One new and six known triterpene xylosides from *Cimicifuga racemosa*: FT-IR, Raman and NMR studies and DFT calculations, *Spectrochimica Acta Part A*, 93 (2012) 10–18. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 15 %.
6. S. Ostrowski, M. H. Jamróz, J. E. Rode, J. Cz. Dobrowolski, 2012, On Stability, Chirality Measures, and Theoretical VCD Spectra of the Chiral $C_{58}X_2$ Fullerenes ($X=N, B$), *J. Phys. Chem. A*, 116 (2012) 631–643. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu i testowaniu miar chiralności za pomocą napisanego przeze mnie programu komputerowego CHIMEA i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
7. M. K. Jamróz, M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, J. A. Gliński, M. H. Davey, I. Wawer, 2011, Novel and unusual triterpene from Black Cohosh. Determination of structure of 9,10-seco-9,19-cyclolanostane xyloside (cimipodocarpaside) by NMR, IR and Raman spectroscopy and DFT calculations, *Spectrochim. Acta A*, 78 (2011) 107–112. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 15 %.
8. M. E. Jamróz, M. Jarosz, J. Witowska-Jarosz, E. Bednarek, Witold Tęcza, M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, J. Kijeński, 2007, Mono-, di-, and tri-tertbutyl ethers of glycerol. A molecular spectroscopic study, *Spectrochim. Acta, A*, 67(2007)980–988. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na interpretacji widm eksperymentalnych IR, dyskusji wyników i analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
9. Ostrowski, S; Dobrowolski, JC; Jamróz, MH; Brzozowski, R, 2004, Equilibrium mixture of the diisopropylbenzenes: a DFT study, *CATALYSIS COMMUNICATIONS*, 5(2004)733–737. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 10 %.

10. R. Brzozowski, W. Skupinski, M. H. Jamróz, et al., Isolation and identification of diisopropylnaphthalene isomers in the alkylation products of naphthalene, 2002, *J. Chromatogr. A*, 946(2002)221-227. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie eksperymentalnych widm IR i dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 10 %.
11. R. Brzozowski, J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, 2002, Theoretical estimation of isomeric composition of cymenes in equilibrium mixture; *Catal. Commun.*, 3-4 (2002) 141-144. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na dyskusji wyników i współudział w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
12. M. A. Borowiak, M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, K. Bajdor, J. K. Kazimirski, J. Mascetti, E. Quaranta, I. Tomassi, M. Aresta, 2001, Application of the impulse-oscillation model for modelling the formation of peroxocarbonates via carbon dioxide reaction with dioxygen transition metal complexes. A comparison with the experimental results obtained for Rh(η^2 -O₂)CIP₃ [P=phosphane ligand], *J. Mol. Catal. A: Chemical.*, 165(2001)45-54. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu obliczeń przy zastosowaniu modelu IOM za pomocą opracowanego przeze mnie oprogramowania, analizie i dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
13. R. Brzozowski, J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, W. Skupiński, 2001, Studies on Diisopropylnaphthalene Substitutional Isomerism, *J. Mol. Catal. A Chemical*, 170(2001)95-99.. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na dyskusji wyników i współudział w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 10 %.
14. J. Rode, J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, M. A. Borowiak, 2001, Theoretical Vibrational and NMR Spectra of 1,2- and 1,3-dimethylenecyclobutane Molecules, *Vib. Spectrosc.*, 25(2001)133-149. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 10 %.
15. J. Rode, J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, M. A. Borowiak, 2001, Theoretical Vibrational Spectra of the Diketene, its Isomers, and their Mono- and Disulphur Analogues, *J. Mol. Struct.*, 565-566(2001)433-438. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 10 %.
16. J. Zawadzki, W. Skupiński, P. Kirszensztejn, L. Wachowski, M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, 2000, FT-IR Spectroscopic Studies of Tin-Modified Rhenium Alumina-Silica Methatesis Catalyst, *Pol. J. Chem.*, 74(2000)1755-1767. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie eksperymentalnych widm IR i dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 5 %.
17. J. Cz. Dobrowolski, M.H. Jamróz, M. A. Borowiak, E. Quaranta, M. Aresta, 2000, Theoretical IR and Raman Spectra of Diketene and its 3-Methylene Isomer, *Vib. Spectry*, 22(2000)19-28. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych, dyskusji wyników i współudział w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 40 %.
18. M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, M. A. Borowiak, 2000, Theoretical IR Spectra of the (2: 1) Ammonia-Carbondioxide System, *Vib. Spectry*, 22(2000)157-161. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych i przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 50 %.
19. M. A. Borowiak, M. H. Jamróz, R. Larsson, 2000, Catalytic decomposition of formic acid on oxide catalysts - III. IOM model approach to bimolecular mechanism, *J. Mol. Catal. A*, 152 (2000)121-132. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu obliczeń przy zastosowaniu modelu IOM za pomocą opracowanego przeze mnie oprogramowania, analizie i dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

20. M. Malesa, W. Skupiński, M. Jamróz, 1999, Separation of Ammonium Dinitramide from Reaction Mixture. *Prop., Explos., Pyrotech.*, 24(1999)83- 89. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie widm IR i dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
21. M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, M. Borowiak, 1999, The CO₂ with dimethylamine reaction: ab initio predicted spectra, *J. Mol. Struct.*, 482-483(1999)633-637. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych, dyskusji wyników i przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 50 %.
22. J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, J. K. Kazimirski, K. Bajdor, M. Borowiak, R. Larsson, 1999, Theoretical Spectra of Difformates: Difformate Anion, *J. Mol. Struct.* 482-483(1999)183-187. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie PED widm teoretycznych. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
23. M. A. Borowiak, M. H. Jamróz, R. Larsson, 1999, Catalytic decomposition of formic acid on oxide catalysts - an impulse-oscillation model approach to the unimolecular mechanism, *J. Mol. Catal. A*, 139(1999)97-104. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu obliczeń przy zastosowaniu modelu IOM za pomocą opracowanego przeze mnie oprogramowania, analizie i dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
24. M. E. Jamróz, M. Palczewska-Tulińska, D. Wyrzykowska-Stankiewicz, A. Szafranski, J. Polaczek, J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, A. P. Mazurek, 1998, The urea-phenol(s) systems, *Fluid Phase Equil.*, 152(1998)307-326. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie eksperymentalnych widm IR. Mój udział procentowy szacuję na 5 %.
25. M. A. Borowiak, M. H. Jamróz, 1998, Impulse oscillation model as a tool for catalyst design, *Intern. J. Chem.*, 1 (1998)CP1-U46. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na rozwoju oprogramowania modelu IOM i uczestniczeniu w opisie modelu. Mój udział procentowy szacuję na 40 %.
26. R. Larsson, M. H. Jamróz, M. A. Borowiak, 1998, On the catalytic decomposition of formic acid. I. The activation energies for oxide catalysis, *J. Mol. Catal. A*, 129(1998) 41-51. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na wykonaniu obliczeń przy zastosowaniu modelu SET za pomocą opracowanego przeze mnie oprogramowania, analizie i dyskusji wyników. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
27. Dobrowolski, JC; Jamroz, MH; Kazimirski, JK; Bajdor, K; Borowiak, MA; Manna, L; Miglietta, ML; Aresta, M, 1998, The M(O₂) X(YH₃)₃ dioxygen complexes (M = Rh, Co; X = F, Cl, Br, I; Y = N, P): An ab initio, DFT and semiempirical PM3(tm) study, *POLISH JOURNAL OF CHEMISTRY*, 72(1998)2205-2217. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.
28. M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, M. A. Borowiak, 1997, Ab initio study on the 1: 2 reaction of, CO₂ with dimethylamine, *J. Mol. Struct.*, 404(1997)105-111. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie widm teoretycznych, dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 40 %.
29. J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, 1995, Background Elimination in Three-Dimensional Intensian Method, *J. Math. Chem.*, 17(1995)111-121. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na udziale w opracowaniu metody intensjanów do analizy widm eksperymentalnych. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
30. M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, K. Bajdor, M. A. Borowiak, 1995, Ab Initio Study of the v (CO₂) Mode in EDA Complexes, *J. Mol. Struct.*, 349(1995)9-12. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na obliczeniu widm teoretycznych, dyskusji wyników i przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.

31. J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, A. P. Mazurek, 1994, Infrared Study on the Double Hydrogen Bond Between the Urea Molecule and Halogenated Aliphatic Hydrocarbon Solvents, *Vib. Spectry*, 8(1994)53-60. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
32. Bajdor, K; Jamróz, MH, 1994, 2nd National Conference on Molecular Spectroscopy in Wroclaw, *Przemysł Chemiczny*, 2(1994)73-73. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na napisaniu raportu. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
33. M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, 1993, IR Study on CH₂X₂ Double Hydrogen Bonding, *J. Mol. Struct.*, 293(1993)143-146. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 40 %.
34. J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, 1993, The IR Evidence of H₂O - Aromatic Hydrocarbons Single Hydrogen Bonding, *J. Mol. Struct.*, 293(1993)147-150. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na interpretacji eksperymentalnych widm IR, opracowaniu i dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 40 %.
35. M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, 1993, Autostandard Method: Quantitative IR Multicomponent Analysis for Films with Indeterminate Pathlength, *Appl. Spectry*, 47(1993) 1209-1213. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w opracowaniu metody autostandardu do analizy widm eksperymentalnych i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 50 %.
36. M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, M. Glice, 1992, Asymmetric Stretching Vibration of CO₂ Occluded in Halogen Salts of Alkaline Metals, *J. Mol. Struct.*, 267(1992)365-370. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na pomiarach widm IR, opracowaniu i dyskusji wyników oraz współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 45 %.
37. J. Cz. Dobrowolski, G. J. Strzemecki, M. H. Jamróz, 1992, Theory of the Intension Method. A Simple Way to Eliminate Baseline Interference with Spectral Band Intensity, *Chemom. Lab. Inteli. Syst.*, 15(1992)39-50. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na współudziale w opracowaniu metody intensjanów, dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 10 %.
38. J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, A. P. Mazurek, 1992, IR Study on Double Hydrogen Bonding in Dichloromethane, *J. Mol. Struct.*, 275(1992)203-210. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu i dyskusji wyników oraz współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
39. J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, 1992, Infrared Evidence for CO₂ Electron Donor-Acceptor complexes, *J. Mol. Struct.*, 267(1992)211- 219. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na opracowaniu i dyskusji wyników oraz na współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
40. J. Kozakiewicz, A. Orzechowski, A. Raszczyk, M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, 1992, Studies on Curicing Urethane prepolymers with Aniline-Formaldehyde Resins, *J. Appl. Polym. Sci.*, 44(1992)1349- 1353. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie widm IR, dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 30 %.
41. J. Dobrowolski, M. H. Jamróz, M. E. Jamróz, D. Wyrzykowska-Stankiewicz, A. M. Szafranski, J. Polaczek, 1988, Infrared, Cryometric and Calorimetric Studies on the Urea-Phenol System, *J. Mol. Struct.*, 175(1988)227-232. Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na analizie IR widm eksperymentalnych, dyskusji wyników i współudziale w przygotowaniu manuskryptu. Mój udział procentowy szacuję na 20 %.

Przed doktoratem:

1. M. Jamróz, Z. Latek, Z. Hippe, 1986, The Dynamic Interpretation of Infrared-Spectra, Anal. Chim. Acta, 181(1986) 65-77.
2. M. Jamróz, Z. Latek, Z. Hippe, 1985, Recognition of Substructures in Organic-Compounds Based on Artificial-Intelligence - Interpretation of Infrared-Spectra, Chem. Anal. (Warsaw) 30 (1985)599-608.
3. M. Jamróz, Z. Latek, 1984, The Algorithm Of Substructure Recognition in Organic-Compounds by The Artificial-Intelligence Method on The Basis of IR-Spectra, J. Mol. Struct., 115(1984)277-280.
4. T. Biernacka J. Witwicka M. Jamróz et al., 1982, Determination of Free Fatty-Acids Of Ricinus Oil By IR Spectrometry, Chem. Anal. (Warsaw) 27 (1982)11-23.

Ogółem: 60 publikacji w czasopismach znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JRC) Ponadto, opracowany przeze mnie program VEDA, udostępniony społeczności międzynarodowej, jest cytowany ponad 200 razy w czasopismach z bazy JCR.

Michał Jamróz

Uzyskane Patenty

T. Opalińska, R. Brzozowski, M. H. Jamróz, S. Pawłowski, K. Bajdor, B. Ulejczyk
Sposób modyfikacji katalizatorów heterofazowych, zwłaszcza zeolitów, z zastosowaniem plazmy
Eng. Method for modifying heterophase catalysts, particularly zeolites, with help of plasma)
PL 208435 6.12.2010
J. Polaczek, T. Kreczmer, Z. Lisicki, M.E. Jamróz, A. Krześlak, M.H.Jamróz,
J. Dobrowolski, A. Szafranski, D. Wyrzykowska-Stankiewicz, T. Porębski
Sposób wydzielania fenoli z ich roztworów,.
Patent nr 147 968 (1990r)

Monografie: brak

Ekspertyzy:

M. H. Jamróz (100%), 1996-1999, Identyfikacja mikro-zanieczyszczeń ekranów TV metodą mikroskopii IR, dla Polkolor, Warszawa, ponad 20 ekspertyz, raporty poufne
M. H. Jamróz (100%), 1995-2004, Identyfikacja dostarczonych materiałów metodą IR, dla Wytwórnia Papierów Wartościowych, Warszawa, ponad 10 ekspertyz, raporty poufne

Sumaryczny *impact factor* według listy Journal Citation Reports (JCR): 122

Liczba cytowań publikacji według bazy Web of Science (WoS): 485

Indeks Hirscha według bazy Web of Science (WoS): 13

Kierowanie międzynarodowymi i krajowymi projektami badawczymi oraz udział w takich projektach

Projekty międzynarodowe:

M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie realizowanym w latach 1995-1998 RUCADI BRRT-CT95-CT98-5089, RUCADI WP5-CO2 Chemical Utilization, koordynator prof. Michele Aresta, kierownik w Polsce doc. dr hab. Marek Borowiak.
M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie realizowanym w latach 1998-2002 COST D9/0012/98 **Development and applications of theoretical models on catalysis to support the design of improved catalysts**. Koordynator prof. Ragnar Larsson, kierownik w Polsce doc. dr hab. Marek Borowiak.
M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie realizowanym w latach 1994-1998 COST D3/0107/94 pt. **Modelling of Selective Energy Transfer, Spatal and Time Coherence in Catalytic Reactions, tested on carbon Dioxide reactions**, koordynator prof. Ragnar Larsson, kierownik w Polsce doc. dr hab. Marek Borowiak.

Udział w grantach krajowych:

M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie realizowanym w latach 2008-2010, N N204 242034, pt. **Spektroskopia inspirowna biologią: struktura, energia, widma i dynamika betaaminokwasów**. Grant jest kierowany przez prof. dr. hab. Joannę Sadlej i realizowany przez Wydział Chemii UW.

M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie N R05 0010 04 realizowanym w latach 2008-2010 pt. **"Ogniwa paliwowe z elektrolitem polimerowym wykorzystujące bezplatynowe elektrokatalizatory nowej generacji"**. Kierownik dr Piotr Piela.

M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie realizowanym w latach 2005-2007, 3T09A 088 28, pt. **Wpływ oddziaływań międzymolekularnych na parametry widm oscylacyjnego dichroizmu kołowego VCD**. Grant jest kierowany przez prof. dr. hab. Joannę Sadlej.

M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie realizowanym w latach 2000-2003 grant PBZ/KBN/018/T09/99/1a pt. **Aktywatory i aktywacja wiązania węgiel-wodór w metanie**, kierowanym przez doc. dr hab. Marka A. Borowiaka.

M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie realizowanym w latach 1999-2002 grant 3 T09B05017 pt. **Rozwój i zastosowanie modeli teoretycznych katalizy w projektowaniu ulepszonych katalizatorów**, kierowanym przez doc. dr hab. Marka Borowiaka.

M. H. Jamróz był wykonawcą w grantie realizowanym w latach 1995-1998 grant 3 T09B03309 pt. **Modelowanie selektywnego przenoszenia energii, warunków przestrzennych i synchronizacji w reakcjach katalitycznych na przykładach reakcji dwutlenku węgla**, kierowanym przez doc. dr hab. Marka Borowiaka.

Inne:

M. Borowiak, R. Brzozowski, J. Cz. Dobrowolski, M. H. Jamróz, A. Zimowski, B. Kąkol, J. Kozakiewicz, A. Lipkowski, S. Ostrowski, J. Przybylski, J. Rzepkowska-Rode, W. Skupiński (M. H. Jamróz - wykonawca projektu) „Narzędzia i techniki komputerowego wspomagania inżynierii chemicznej CAPE: modelowanie molekularne”, Warszawa, 2002 (Eng. Tools and techniques for computer-aided methods of chemical engineering CAPE: molecular modelling). ICRI investigation report, 2002, Warsaw

Międzynarodowe i krajowe nagrody za działalność naukową

2013, Pierwsza nagroda dla grupy kierowanej przez J. Cz. Dobrowolskiego (w tym M. H. Jamróz) – konkurs Świętosławskiego, Instytut Chemii Przemysłowej, Warszawa.

2011, Medal złoty za całokształt działalności, Prezydent RP

Michał Jamróz

III Dorobek dydaktyczny i popularyzatorski oraz informacja o współpracy międzynarodowej habilitanta

Aktywny udział w międzynarodowych konferencjach naukowych

Prace prezentowane przez habilitanta (od 1991):

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz. Glice M.

Asymmetric Stretching Vibration of CO₂ Occluded in Halogen Salts

First National Conference on Molecular Spectroscopy: Vibrational Spectroscopy (with international participation), Wrocław, Polska, 28-30 październik 1991

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz.

CO₂ Inclusion in Halogen Salts of Alkaline Metals

XX European Congress on Molecular Spectroscopy, Zagrzeb, Jugosławia, 25-30 sierpień 1991, Presentation on post-conference meeting

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz.

IR study on CH₂X₂ Double Hydrogen Bonding

XXI European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Wiedeń, Austria, 23-28 sierpnia 1992

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.E., Polaczek J.

Infrared Determined Thermodynamic Parameters and SEL-Diagrams of Carbazole-Tertiary Amide Systems

IInd Conference on Molecular Spectroscopy with international participation, Wrocław, Polska, wrzesień, 1993

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.E., Polaczek J.

Hydrogen Bond in Carbazole-Tertiary Amide System

European Conference on Analytical Chemistry EUROANALYSIS VIII, Edynburg, Wielka Brytania, wrzesień 1993

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Bajdor K., Borowiak M.

Ab Initio Study of the ν_2 (CO₂) Mode in EDA Complexes

XXII European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Essen, Niemcy 11-16 września 1994

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Borowiak M.

Ab initio Study on the CO₂ with Dimethylamine 1:2 Reaction

IIIrd Conference on Molecular Spectroscopy with international participation, Wrocław, Polska, 7-9 grudnia 1995

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Borowiak M.

The, CO₂ with Dimethylamine Reaction: ab initio Predicted Vibrational Spectra

XXIV European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Praga, Czechy, 23-28 sierpnia 1998

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Borowiak M.
Theoretical IR Spectra of Ammonia-Carbon Dioxide 2:1 System
7th Austrian Hungarian International Conference on Vibrational Spectroscopy, Balatonfüred,
Węgry, 8-11 kwietnia 1999

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz.
Potential Energy Distribution Analysis of DFT and ab initio Calculated IR Spectra of the Most
Stable Li, Na and Cu(I) Diformate Molecules
International Conference on Progress in Computing of Physicochemical Properties, Warszawa, 18-
20 listopada 1999

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz.
Potential Energy Distribution Analysis (PED) of DFT and ab initio Calculated IR Spectra of the
Most Stable Li, Na and Cu Diformate Molecules
XXV European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Coimbra, 27 sierpnia-1 września
2000

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz.
Theoretical IR Spectra and Stability of Carbamic Acid Complexes
The First International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy ICAVS-1, Turku,
Finlandia, 19-24 sierpnia 2001

Jamróz M. H.
Theoretical and Experimental IR Spectra and Stability of Dibenzyl Carbamic Acid Complex
Seminarium Zespołu COST, Budapeszt, Węgry, marzec 2002

Jamróz M.H., Brzozowski R., Dobrowolski J.Cz.
Elucidation of Experimental IR Spectra of Diisopropylnaphthalenes Based on Analysis of
Theoretical Spectra
XXVI European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS'2002, Villeneuve d'Ascq,
Francja, 1-6 września 2002

Jamróz M.H., Ostrowski S., Dobrowolski J.Cz.
Modelling of a Methane Reaction on Rh Catalyst
18th Dubrovnik International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics,
Chemistry and Computer Sciences, Dubrownik, Chorwacja, 23-28 czerwca 2003

Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz.
Experimental and Theoretical Vibrational Spectra of the $((\text{CH}_3)_3\text{P})_2\text{ClRhCO}$ Catalyst
18th Dubrovnik International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics,
Chemistry and Computer Sciences, Dubrownik, Chorwacja, 23-28 czerwca 2003

Jamróz M.H., Brzozowski R., Dobrowolski J.Cz.
Elucidation of Theoretical IR Spectra of Diisopropylnaphthalenes. PED Analysis
XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS'2004, Kraków, Polska, 5-10

września 2004

Prace prezentowane przez współautorów:

Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H.

Infrared Evidence of CO₂ Electron Donor-Acceptor Complexes

First National Conference on Molecular Spectroscopy: Vibrational Spectroscopy (with international participation), Wrocław, Polska, 28-30 październik 1991

Skarżyński M., Wawer J. Bednarek E., Jamróz M. H, Polaczek J.

Investigation of Conformational Transitions in N-methyl -E-caprolactam with ¹H and ¹³C NMR
XXVII Colloquium Spectroscopicum Internationale, Bergen, Norwegia, 9-14 czerwca 1991

Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., Mazurek A. P.

The IR Study of Hydrogen Bonded Methyl of CH₃I

European Conference on Analytical Chemistry EUROANALYSIS VIII, Edynburg, Wielka Brytania, wrzesień 1993

Dobrowolski J.Cz., Manna L, Migietta M, Jamróz M.H., Bajdor K, Borowiak M

Semiempirical PM3(tm) Study on the (YH₃)MeO₂ Complexes

XXIII European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Balatonfüred, Węgry, 25-30 Września 1996

Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., Palczewska-Tulińska M, Szafranski A., Wyrzykowska-Stankiewicz D., Polaczek J., Mazurek A. P.

Solid-Liquid Equilibria and Hydrogen Bond Interaction Studies in Urea-Phenols Binary Systems

International Conference on Applied Physical Chemistry, Warszawa, Polska, 13-16 Listopada 1996

Jamróz M. E., Lisicki Z., Palczewska-Tulińska, Polaczek J., Jamróz M.H., Kazimirski J., Dobrowolski J.Cz.

The Carbazole-Tertiary Amide Systems

International Conference on Applied Physical Chemistry, Warszawa, Polska, 13-16 Listopada 1996

Borowiak M, Jamróz M. H.

Impulse Oscillation Model as a Tool for Catalyst Design

4th Electronic Computational Chemistry Conference ECCC-4, listopad 1997

Larsson R., Borowiak M, Jamróz M. H. Kazimirski J., Bajdor K., Dobrowolski J.Cz.

The HCOOH Catalytic Decomposition on Metal Oxides Considered as Vibrationally Activated Reaction

3rd European Congress on Catalysis Europa CAT 3, Kraków, Polska, 23sierpnia-6września 1997

Dobrowolski J.Cz., Kazimirski J., Bajdor K., Jamróz M.H., Borowiak M, Larsson R.

Theoretical Vibrational Spectra of Anion Diformates

XXIV European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Praga, Czechy, 23-28 sierpnia 1998

Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., Borowiak M., Quaranta E., Aresta M
Theoretical IR and Raman spectra of Diketene and Its 3-Methylene Isomer
7th Austrian Hungarian International Conference on Vibrational Spectroscopy, Balatonfüred,
Węgry, 8-11 kwietnia 1999

Ostrowski S., Jamróz M.H., Borowiak M.
Modelling of HCOOH Decomposition Reactions on Metal Catalysts
International Conference on Progress in Computing of Physicochemical Properties, Warszawa, 18-
20 listopada 1999

Zawadzki J., Skupiński W., Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Kirszensztein P., Wachowski L.
FTIR Studies of Re₂O₇/Al₂O₃-SiO₂/TMT Systems
13th International Symposium on Olefin Methathesis, Reldur, Holandia, 11-15 lipca 1999

Rzepkowska J., Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., Borowiak M.,
Theoretical Vibrational Spectra of the Diketene, and Their Mono- and Disulphur Analogues
XXV European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Coimbra, 27 sierpnia-1 września
2000

Rzepkowska J., Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., Borowiak M.,
Theoretical Vibrational and NMR Spectra of 1,2 and 1,3-Dimethylcyclobutane Molecules
XXV European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Coimbra, 27 sierpnia-1 września
2000

Ostrowski S., Jamróz M.H., Larsson R., Borowiak M.
Decomposition of HCOOH on Metal Catalysts: Cu and Mo Catalysts
5th European Congress on Catalysis EuropaCat-V, Limerick, Irlandia, 1-7 września 2001

Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., PAH Molecules of the Belt and Moebius Types
17th Dubrovnik International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics,
Chemistry and Computer Sciences, Dubrownik, Chorwacja, 24-29 czerwca 2002

Ostrowski S., Jamróz M.H., Borowiak M.
Modelling of Catalytic Reaction in [CO₂+H₂+NH₃] System: Impulse Oscillation Model Study
17th Dubrovnik International Course & Conference on the Interfaces among Mathematics,
Chemistry and Computer Sciences, Dubrownik, Chorwacja, 24-29 czerwca 2002

Dobrowolski J.Cz., Rzepkowska-Rode J., Dobrosz-Teperek K., Kołos R., Jamróz M.H.,
Lewandowski W., Bajdor K., Mazurek A.P.
Vibrational Spectra of 5-Halogenouracils. Part III. Deformation Modes
10th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules, Szeged, Węgry, 30
sierpnia-4 września 2003

Borowiak M., Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., Ostrowski S., Rzepkowska-Rode J.
Development and Applications of Theoretical Models on Catalysis to Support the Design of
Improved Catalysis
Seminarium Zespołu COST, Bordeaux, Francja, 28 czerwca-1 lipca 2001

Dobrowolski J.Cz., Rzepkowska-Rode J., Kołos R., Jamróz M.H., Bajdor K., Mazurek A.P.
Ar-Matrix IR Spectra of 5-Halouracils
XXVII European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Kraków, Polska, 5-10 września 2004

Dobrowolski J.Cz., Sadlej J., Rzepkowska-Rode J., Jamróz M.H., Kołos R.
DFT Study on Vibrational Spectroscopy Markers of Conformations of the Cysteine Molecule in the Gas Phase
XXVIII European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS'2006, Istambul, Turcja, 3-8 września 2006

Jamróz M.E., Jarosz M., Witowska-Jarosz J., Bednarek E., Tęcza W., Jamróz M.H., Dobrowolski J.Cz., Kijeński J.
Mono-, di-, and tri-tert-Butyl Ethers of Glycerol. A Spectroscopic Study XXVIII European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS'2006, Istambul, Turcja, 3-8 września 2006

Ostrowski S., Kołos R., Jamróz M.H., Kijeński J., Dobrowolski J.Cz.
Ar-Matrix IR Spectra of 2-Propanol and Its OD, D7, and D8 Isotopomers
XXVIII European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS'2006, Istambul, Turcja, 3-8 września 2006
Sadlej J., Dobrowolski J.Cz., Rzepkowska-Rode J., Jamróz M.H.
DFT Study of Vibrational Circular Dichroism Spectra of D-Lactic Acid-Water
XXVIII European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS, Istambul, Turcja, 3-8 września 2006

Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., Kołos R., Rzepkowska-Rode J., Sadlej J.
Theoretical Prediction and the First IR-Matrix Observation of Several L-Cysteine Molecule Conformers
4th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, Korfu, Grecja, 10-15 czerwca 2007

Dobrowolski J.Cz., Ostrowski S., Kołos R., Jamróz M.H., Kijeński J.
Ar-Matrix IR Spectra of 2-Propanol and Its OD, D7 and D8 Isotopomers 4th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, Korfu, Grecja, 10-15 czerwca 2007

Dobrowolski J.Cz., Jamróz M.H., Kołos R., Rzepkowska-Rode J., Sadlej J.
IR Low-Temperature Matrix and ab initio Study on beta-Alanine Conformers
XXIX European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS'2008, Opatija, Chorwacja, 31 sierpnia-5 września 2008

Jamróz M.E., Jamróz M.H., Rzepkowska-Rode J., Dobrowolski J.Cz.
Interpretation of Vibrational Spectra of Allyl Acrylate
XXIX European Congress on Molecular Spectroscopy EUCMOS'2008, Opatija, Chorwacja, 31 sierpnia-5 września 2008

Baran A., Jamróz M.H., Dobrowolski J.C., Barańska M.
The Interpretation of Vibrational Spectra of Alizarine. Experimental and Computational Study.

Xth International Conference on Molecular Spectroscopy "From Molecules to Molecular Materials and Biological Systems", Kraków-Białka Tatrzańska, Polska, 6-10 września 2009

Dobrowolski J.C., Jamróz M.H., Kołos R., Rzepkowska-Rode J., Sadlej J.
L-isoserine Conformation in Low-Temperature IR Matrix Spectra Interpreted by Means of the DFT Calculations

XIII European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules, Palermo, Włochy, 28 sierpnia-2 września 2009

Dobrowolski J.C., Jamróz M.H., Kołos R., Rzepkowska-Rode J., Sadlej J.
L-isoserine Conformation in Low-Temperature IR Matrix Spectra Interpreted by Means of the DFT Calculations

Xth International Conference on Molecular Spectroscopy "From Molecules to Molecular Materials and Biological Systems", Kraków-Białka Tatrzańska, Polska, 6-10 września 2009

Jamróz M.H., Rode J.E., Ostrowski S., Dobrowolski J.Cz.

On chirality of amino acids

13th International Conference on Chiroptical Spectroscopy, Oxford, W. Brytania, 24-28 lipca 2011

Rode J.E., Dobrowolski J. Cz., Jamróz M.H., Sadlej J.

VCD chirality transfer: a new insight into the intermolecular interactions

XIIth International Conference on Molecular Spectroscopy, Białka Tatrzańska, 8-12 września 2013

Recenzowanie publikacji w czasopismach międzynarodowych i krajowych

1. Spectrochimica Acta A, 9 recenzji
2. Journal of Molecular Structure, 5 recenzji
3. Vibrational Spectroscopy, 3 recenzje
4. Zeitschrift für Physikalische Chemie, 1 recenzja

Inne osiągnięcia:

I. Opracowanie metod analitycznych do spektroskopii:

Współdział w opracowaniu metody intensjanów do analizy ilościowej pasm położonych na nieliniowym tle, lub pasm w spektroskopii dwuwymiarowej [29].

Współdział w opracowaniu metody autostandardu do w zastosowaniu do metod spektroskopowych [35].

II. Opracowanie programów komputerowych:

- a) Opracowanie programu IRDIN do interpretacji eksperymentalnych widm IR na podstawie dynamicznego zastosowania tablic korelacyjnych (1984-1986, doktorat).
- b) Oprogramowanie i testowanie dwóch modeli do przewidywania własności katalizatorów i ich przydatności w badanych reakcjach chemicznych.
 - 1). Model IOM (Impulse Oscillation Model) Borowiaka [12, 19, 23, 25]
 - 2) Model SET (Selective Energy Transfer) Larssona [26].
- c) Opracowanie i testowanie programu SPESCA do porównywania teoretycznych i eksperymentalnych widm IR i Ramana. Program dostępny na stronie www.smmg.pl
- d) Opracowanie i testowanie programu CHIMEA [4, 6] wyznaczający klasę miar chiralności molekuł opartą na podobieństwie enancjomerów.

Michał Jamioł

6. Omówienie celu naukowego przedstawianego osiągnięcia i wykorzystania go w pracach badawczych

Załącznik 2a. Wersja angielska

Załącznik 3. Oświadczenia współautorów

Załącznik 4. Kopie publikacji naukowych wchodzących w skład cyklu stanowiącego osiągnięcie habilitacyjne.

Załącznik 5. Wydruk z bazy danych Web of Science6. Omówienie celu naukowego przedstawianego osiągnięcia i wykorzystania go w pracach badawczych.

6. Omówienie celu naukowego przedstawianego osiągnięcia i wykorzystania go w pracach badawczych

Dr Michał H. Jamróz. Instytut Chemii i Techniki Jądrowej, Warszawa

Analiza PED teoretycznych widm oscylacyjnych za pomocą programu VEDA

Prolog

Od lat 80. XX w. zajmowałem się interpretacją doświadczalnych widm oscylacyjnych. Moje zainteresowania naukowe zaowocowały w 1986 r. pracą doktorską, w której skonstruowałem i opisałem program do interpretacji widm doświadczalnych na podstawie dynamicznego przypisania pasm w oparciu o tablice korelacyjne. Program ten był przez lata stosowany do celów dydaktycznych na Uniwersytecie Wrocławskim i Politechnice Rzeszowskiej oraz do prac analitycznych w Instytucie Chemii Przemysłowej. Należy jednak podkreślić, że w wielu wypadkach widmo doświadczalne nie może być całkowicie jednoznacznie zinterpretowane, szczególnie w tzw. zakresie *finger print*. Związane jest to z nakładaniem się pasm, niejednoznacznością położenia i natężenia pasm charakterystycznych oraz złożonością drgań szkieletowych. Ponadto, sąsiadujące grupy funkcyjne wpływają wzajemnie na położenia, natężenia i szerokości pasm, komplikując rozwiązanie problemu.

W połowie lat 90. XX wieku zacząłem stosować, oprócz spektroskopii doświadczalnej, metody obliczeniowe chemii kwantowej. Ważnym aspektem powstałych prac obliczeniowych było wyznaczanie widm teoretycznych, głównie w celu interpretacji widm eksperymentalnych. Oprócz wielu problemów technicznych takich jak wybór metody obliczeniowej, bazy funkcyjnej, korekty na anharmoniczność drgań itp., pojawił się problem zrozumienia postaci obliczonych drgań normalnych. Drganie normalne jest ruchem całej molekuly bez zmiany środka masy. Układów współrzędnych wewnętrznych molekuly, które mogłyby opisać drgania, jest nieskończenie wiele, a układ drgań normalnych wyróżnia wzajemna ortogonalność drgań. Tylko w niektórych drganiach porusza się głównie niewielki wyróżniony fragment molekuly. Większość drgań to bardzo złożony ruch wielu atomów. Im większa jest molekula tym trudniej zinterpretować poszczególne drgania. W celu interpretacji drgań normalnych wprowadzono procedurę wyrażania współrzędnych normalnych, jako sumy współrzędnych lokalnych odpowiadających grupom funkcyjnym i fragmentom szkieletu. Współrzędne lokalne mają postać zmian długości wiązań, kątów między wiązaniami i kątów dwuściennych wiązań. W dalszej części pracy nazywam taki układ współrzędnych: SBT („Stretching, Bending, Torsion”). Powyższa procedura, nazywana rozkładem energii potencjalnej PED (*Potential Energy Distribution*), pozwala na wyrażenie energii drgania normalnego, jako sumy energii drgań fragmentów. Podstawowym problemem procedury PED jest skonstruowanie układu współrzędnych lokalnych tak, aby najlepiej przybliżał układ współrzędnych normalnych. W momencie, w którym zetknąłem się z procedurą PED stosowano ją przede wszystkim do interpretacji widm molekuł mniej niż 20 atomowych. Związane to było z faktem, że dla większych molekuł konstrukcja odpowiedniego układu współrzędnych lokalnych jest trudna.

Spektroskopia oscylacyjna (IR i Ramana) jest jedną z podstawowych metod charakterystyki związków chemicznych stosowaną w chemii organicznej i nieorganicznej, chemii polimerów i nowych materiałów, chemii fizycznej (w tym oddziaływań między- i wewnątrz-molekularnych), fizyce, chemii medycznej (farmacji) i medycynie. W każdym z zastosowań ważne jest zrozumienie

charakteru obserwowanych pasm. W celu zrozumienia widm eksperymentalnych obecnie nieodzowne jest wykonanie obliczeń widm teoretycznych badanych związków i ich interpretacja. Najdokładniejszą metodą interpretacji teoretycznych widm oscylacyjnych jest analiza PED.

Celem mojej pracy badawczej było udoskonalenie interpretacji teoretycznych widm oscylacyjnych realizowanej za pomocą metody PED. Aby osiągnąć ten cel należało rozwinąć wiele elementów analizy PED, które ująłem w moim programie VEDA. Podstawowym z nich była automatyczna konstrukcja niezależnych liniowo układów współrzędnych lokalnych. Następnie należało znaleźć (automatycznie zbudować) złożone współrzędne, które najlepiej oddają drgania normalne. Kolejnym celem było umożliwienie interpretacji drgań molekuł średniej wielkości o znacznie większym praktycznym znaczeniu dla chemii niż małe molekuły. Warunkiem dobrej interpretacji jest znalezienie optymalnego rozwiązania: współrzędne muszą dobrze odpowiadać drganiom normalnym, mają być zrozumiałe dla osoby analizującej widmo, a zarazem muszą być jak najmniej skomplikowane. Analiza PED nie jest jednoznaczna, a interpretacja PED jest wtedy dobra, kiedy pozwala dobrze zrozumieć badane zjawisko. Dlatego kolejnym moim zadaniem badawczym było umożliwienie interpretatorowi takiego ujęcia problemu, aby najlepiej uwidocznili badany efekt spektroskopowy. Wreszcie ostatecznym celem dobrej interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych jest zawsze jak najdokładniejsza interpretacja widm doświadczalnych. Program VEDA dobrze spełnia ten warunek. Świadczy o tym fakt, że po stosunkowo niedawnym udostępnieniu programu międzynarodowej społeczności naukowej był on zastosowany już w ponad 200 problemach badawczych opublikowanych w uznanych czasopismach naukowych.

Program VEDA rozwijałem stopniowo stosując go w rozwiązywaniu kolejnych problemów interpretacyjnych teoretycznych widm oscylacyjnych. Pierwszym krokiem była automatyczna generacja układu lokalnych współrzędnych [H2, 9]. Następnym zastosowanie programu VEDA do bardziej skomplikowanych układów [H3, H4]. Kolejną innowacją zastosowaną w analizie widm dużych molekuł było rozłączenie analizy drgań związanych tylko z fragmentami szkieletu, np. CC od tych związanych z grupami CH układów aromatycznych i alifatycznych [H5, H7]. Rozłączenie drgań atomów ciężkich CC i CH znacznie poprawiło klarowność interpretacji. Takie rozłączenie można stosować również dla grup NH i OH. Powodzenie zastosowanej innowacji uświadomiło mi konieczność wprowadzenia nowej kategorii drgań, którą nazwałem kategorią "User". Zastosowanie kategorii "User" umożliwia interpretatorowi wyselekcjonowanie drgań fragmentów specjalnie ważnych w rozwiązywaniu konkretnego problemu i traktowanie wybranych drgań w inny sposób niż pozostałe. Może to mieć wielorakie zastosowanie, np. przy porównaniu widm szeregu pochodnych, konformerów, izomerów, izotopologów itp. [H6, H9 - H14]. We wszystkich zagadnieniach analizy PED kluczowa jest optymalizacja, czyli uzyskanie najlepszego, a zarazem najprostszego przybliżenia współrzędnych drgań normalnych poprzez współrzędne lokalne [H1 - H15]. W tym procesie uwzględniane są też ruchy poszczególnych atomów (procedura ADM), a także redukcja i normalizacja współrzędnych. Cały program, łącznie ze schematem jego algorytmu i przykładami, opisałem w publikacji [H1].

Całkowicie nowymi elementami mojego podejścia jest automatyczna konstrukcja współrzędnych lokalnych, automatyczna konstrukcja współrzędnych złożonych, optymalizacja analizy PED, analiza dużych molekuł zbudowanych z 240 (a w specjalnej wersji z 480) atomów oraz interaktywna możliwość ingerencji w sposób interpretacji na każdym etapie analizy. Dzięki temu program VEDA może być stosowany przez mało doświadczonych spektroskopistów, a zarazem jest mocnym narzędziem w rękach doświadczonego interpretatora.

1.1. Badanie zmian widm oscylacyjnych na ogół wymaga wsparcia ze strony obliczonych widm teoretycznych. Dzieje się tak, dlatego, że liczne pasma z zakresu „*finger-print*” ($1400\text{--}400\text{ cm}^{-1}$) jest trudno przypisać jedynie na podstawie wiedzy eksperymentalnej. Obliczane widma teoretyczne z zastosowaniem współczesnych metod chemii kwantowej dają obecnie wiarygodne rezultaty. Ogólnie, są stosowane dwa sposoby interpretacji widm teoretycznych: wizualizacja drgań atomów w drganiach normalnych oraz analiza rozkładu energii potencjalnej „*Potential Energy Distribution*” (PED) [1–6]. Pierwszy z nich, łatwy i dlatego często stosowany, jest zawodny, gdyż często ruchy atomów lekkich na ogół nie wiążą się z dużą zmianą energii potencjalnej. Natomiast drugi sposób jest dużo trudniejszy, lecz znacznie bardziej wiarygodny, gdyż opiera się na analizie macierzy stałych siłowych i umożliwia jakościową i ilościową obserwację zmian. Jednakże analiza PED jest do pewnego stopnia arbitralna i wymaga od interpretatora wiedzy spektroskopowej. Arbitralność wynika z konieczności zastąpienia drgań normalnych (ruchów harmonicznym wszystkich atomów cząsteczki zgodnych w fazie z zachowaniem położenia środka cząsteczki) drganiami odzwierciedlającymi w sposób przejrzysty ruch grup funkcyjnych cząsteczki. Przejrzystość przedstawienia jest elementem zależnym od woli interpretatora. Badania nad interpretacją teoretycznych widm oscylacyjnych za pomocą metody PED podjąłem w latach 90. XX w, a w 2013 r. opisałem całokształt moich prac nad programem VEDA (*Vibrational Energy Distribution Analysis*) do analizy teoretycznych widm oscylacyjnych w artykule zamieszczonym w *Spectrochimica Acta A* [H1].

1.2. *Analiza PED*. Do opisu drań N atomowej cząsteczki (lub układu cząsteczek oddziałujących) analiza PED wymaga zbudowania układu lokalnych, niezależnych liniowo, $3N-6$ współrzędnych wewnętrznych, opisujących ruchy rozciągające, zginające i deformacyjne grup funkcyjnych lub wyróżnionych fragmentów cząsteczki. Wprowadzenie takiego układu współrzędnych zamiast współrzędnych normalnych powoduje, że macierz dystrybucji energii potencjalnej, macierz PED, przestaje być diagonalna, ale dystrybucja energii związana z ruchami poszczególnych grup funkcyjnych jest zrozumiała dla interpretatora. W 1970 powstał program do analizy PED napisany przez Balgę i później modyfikowany przez Łapińskiego [7, 8]. Program ten wymaga od użytkownika zdefiniowania układu współrzędnych. Już dla 16 atomowej molekuly może to być trudne, gdyż wymaga wprowadzenia 42 niezależnych definicji współrzędnych. Dla 50 atomowego układu jest to praktycznie nieosiągalne.

1.3. *Geneza i rozwój programu VEDA*. Pod koniec lat 1990. zacząłem konstruować program VEDA, automatycznie generujący układ lokalnych współrzędnych [H2]. Po raz pierwszy zacytowano jego użycie przy analizie drań 9-atomowej molekuly [9]. Trzy lata później zastosowany został do bardziej skomplikowanych układów [H3, H4], w tym 66 atomowych [H3]. Od tamtego czasu program był przeze mnie rozwijany i wielokrotnie stosowany, a niedawno został udostępniony środowisku naukowemu. W obecnej wersji program umożliwia analizę układu 120 atomowego w podstawowej wersji (i 240 lub 480 atomowego w rozszerzonych wersjach VEDAx1 lub VEDAx1.). Program jest ogólnie dostępny na stronie internetowej: <http://www.smmg.pl>.

2. Opis zasadniczych problemów rozwiązanych przy konstruowaniu programu VEDA

2.1. Układ współrzędnych SBT (*stretch, bend, tors*), a współrzędne normalne. [H1, H2].

Do opisu drgań badanej struktury program VEDA używa współrzędnych lokalnych zdefiniowanych następująco: „stretching” S (drania rozciągające), „bending” B (drgania zginające) oraz „torsion i/lub out-of-plane” T (drgania deformacyjne). Definicja S wymaga specyfikacji dwóch atomów A-B. Definicja B wymaga specyfikacji trzech atomów A-B-C i opisuje ruch w płaszczyźnie ABC, definicja T wymaga specyfikacji czterech atomów: A-B-C-D i opisuje zmianę kąta dwuściennego pomiędzy płaszczyznami ABC i BCD (torsion) lub wychylenie wektora AD z płaszczyzny ABC (out-of-plane). Definicje te są zgodne z definicjami używanymi w programie Balga [8, 9]. Istotną moją innowacją było wprowadzenie automatycznego generowania układu współrzędnych SBT [9, H2]. Do konstrukcji współrzędnych SBT program VEDA używa atomów połączonych wiązaniami. Dlatego też uprzednio generowana jest macierz połączeń (plik .mpo). Dla N atomowej struktury program VEDA konstruuje w naturalny sposób $3N-6$ współrzędnych: N-1 współrzędnych S, N-2 współrzędnych B oraz N-3 współrzędnych T. Dla kolejnych atomów terminalnych definiowana jest jedna współrzędna S, jedna B i jedna T. Wykorzystany atom nie zostaje już uwzględniany przy konstrukcji następnych współrzędnych. Gdy pozostaną wyłącznie elementy połączone w pierścienie, struktura jest rozrywana pomiędzy dwoma najmniej usieciowanymi i najbardziej odległymi atomami. Gdy pozostaną już trzy elementy, nie można konstruować współrzędnej T. Dla dwóch ostatnich atomów pozostaje jedynie współrzędna S. Znaczenie automatycznego generowania układu współrzędnych SBT rośnie z wielkością analizowanej molekuly. Doświadczony spektroskopista na ogół radzi sobie z konstrukcją układu współrzędnych SBT małych molekuł, natomiast analiza molekuł o ponad 20 atomach jest trudna dla każdego. Wraz z automatyczną propozycją układu współrzędnych zostawiłem możliwość osobistej ingerencji użytkownika w postać układu SBT.

2.2. Liniowa niezależność współrzędnych.

Liniowa niezależność współrzędnych jest warunkiem koniecznym rozwiązania układu równań pozwalających wyznaczyć macierz PED [H1]. Zapewnienie liniowej niezależności współrzędnych w analizie PED może być trudne dla symetrycznych molekuł nawet tak małych jak ośmioatomowa molekula mocznika [17].

Liniowa niezależność współrzędnych jest sprawdzana przy każdym uruchomieniu programu VEDA. Dla niepłaskich i niesymetrycznych struktur, nie zawierających elementów prostopadłych do płaszczyzny, sposób konstrukcji współrzędnych podany w punkcie 2.1 jest w zasadzie niezawodny. W wypadku wystąpienia liniowej zależności współrzędnych (np. spowodowanej koincydencją współrzędnych zginających i torsyjnych), użytkownik programu jest o tym informowany i albo zdaje się na automatyczną akcję programu VEDA, albo sam edytuje wybraną definicję. Ręczna edycja współrzędnych wymaga bardzo dużego doświadczenia interpretatora, dlatego dużo pracy poświęciłem automatycznemu rozwiązaniu problemu przez program VEDA. Procedura automatyczna wykorzystuje współrzędne alternatywne opisane w punkcie 2.4. Akcja testowania współrzędnych alternatywnych przez program może być poprzedzona grupową wymianą współrzędnych pomiędzy zbiorami współrzędnych podstawowych i alternatywnych. Oprócz tego, w programie jest też kilka

sposobów generowania układu współrzędnych podstawowych, np. wyrażenie drgań deformacyjnych wyłącznie poprzez współrzędne torsyjne (i umieszczenie współrzędnych out-of-plane wyłącznie w zbiorze drgań alternatywnych), lub, dla struktur zawierających pierścienie, nieco inne zdefiniowanie współrzędnych wykorzystujące fakt istnienia dodatkowego wiązania. Sposoby te można stosować metodą prób i błędów bez wnikania w istotę zagadnienia, co ma znaczenie dla dużych układów. Program VEDA na ogół łatwo eliminuje problem liniowej zależności współrzędnych, co potwierdziła zarówno analiza teoretycznych widm IR symetrycznych konformerów małej molekuly izopropanolu i jej izotopologów [H11], jak i dimeru kwasu dibenzylkarbaminowego, który ma płaski symetryczny fragment zawierający wiązania międzymolekularne [H3].

2.3. Współrzędne złożone.

Konieczność wprowadzenia współrzędnych złożonych pojawia się już dla 3 atomowych molekuł takich jak H_2O czy CO_2 , w których drgania rozciągające wiązań sprzęgają się i obserwuje się drgania rozciągające symetryczne i asymetryczne. Zastosowanie generowanego automatycznie początkowego układu SBT powoduje, że w opisie drgań badanej struktury (macierz PED) wiele z nich, nawet dla prostych molekuł, jest wyjaśnianych za pomocą kilku lub kilkunastu pojedynczych (niezłożonych) współrzędnych. Ponadto, niektóre z drgań pozostają niewyjaśnione (tzn. brak jest współrzędnych, których wkład PED przekracza 10%). Dlatego od samego początku program VEDA automatycznie grupuje podobne drgania i łączy je we współrzędne złożone [9, H2]. Wcześniejsze programy zmuszały użytkownika do konstruowania takich współrzędnych samemu. Tworzenie współrzędnych złożonych ma na celu precyzyjniejsze odzwierciedlenie drgania normalnego za pomocą drgań lokalnych i zwiększenie stopnia diagonalizacji macierzy PED. W rezultacie uzyskuje się nowy układ SBT o współrzędnych bardziej wyrazistych, łatwiej zrozumiałych dla użytkownika. W programie wprowadziłem optymalizację współrzędnych złożonych polegającą na iteracyjnym zastępowaniu współrzędnych i sprawdzaniu stopnia diagonalizacji macierzy PED (patrz punkt 3.2). Procedura ta została pozytywnie zweryfikowana w analizie 66 atomowego dimeru kwasu dibenzylkarbaminowego, który ma 192 podstawowe drgania normalne [H3].

2.4. Współrzędne alternatywne

Dla atomów terminalnych możliwa jest tylko jedna współrzędna typu S, lecz są, co najmniej dwie możliwości wyboru współrzędnej B, oraz kilka możliwości wyboru współrzędnej T. Dla układów zawierających pierścienie istnieje również pewien wybór współrzędnych S. Jest to powodem, dla którego program VEDA, oprócz podstawowego układu współrzędnych SBT, generuje układ współrzędnych alternatywnych. Współrzędne te mogą, lecz nie muszą być użyte. Są one przydatne przy usuwaniu liniowej zależności współrzędnych [17, H11]. Znajdują również zastosowanie w procesie optyimizacji (punkt 3.2), szczególnie dla układów międzymolekularnych [H3, H4].

2.5. Kategorie CH i not CH [H5, H7]

Podczas opracowywania struktur dużych molekuł izomerów diizopropylonaftalenu (Schemat 1) złożonych wyłącznie z grup CH aromatycznych i alifatycznych, które cechują się 102 drganiami [H5, H7], przekonałem się, że warto jest traktować niezależnie współrzędne zawierające atom wodoru i współrzędne złożone wyłącznie z atomów ciężkich. W przeciwnym wypadku współrzędne złożone (punkt 2.3) stają się zbyt zawiłe już dla układów zawierających ponad 20 atomów. Analiza PED z zastosowaniem tego podziału pozwoliła na pełne zrozumienie odzwierciedlenia w widmach oscylacyjnych różnic wynikających z budowy izomerów diizopropylonaftalenów. Od tamtego czasu podział na kategorie CH i not CH został wprowadzony na stałe do programu VEDA. Do kategorii CH mogą, w zależności od woli użytkownika, zostać włączone grupy NH i OH. Jednakże w programie pozostawiona została możliwość rezygnacji z traktowania niezależnie drgań CH i not CH, co może mieć zastosowanie dla prostych układów.

2,6-DIPN	2,7-DIPN	2,3-DIPN
Schemat 1. Trzy izomery diizopropylonaftalenu [H7]		

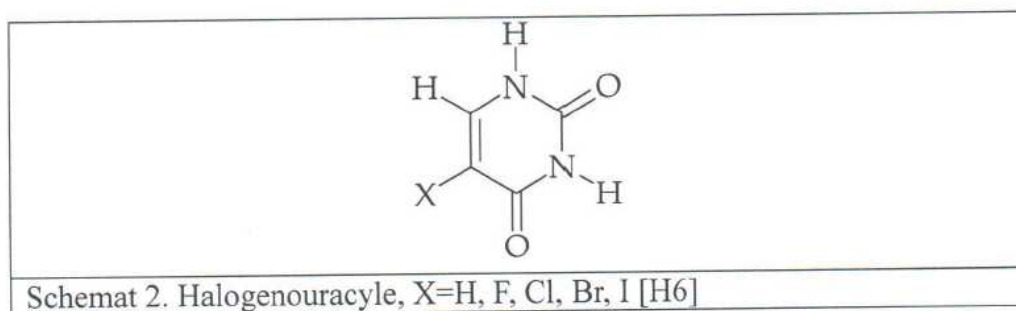
2.6. Kategoria "User" [H6, H8 - H14]

Przed, po i w trakcie procesu optymalizacji użytkownik może edytować plik definicji drgań (plik .dd2) i wprowadzać własne definicje wybranych drgań. W ten sposób pojawia się możliwość niezależnego traktowania wybranych drgań. Użytkownik może wykluczyć wybrane definicje z procesu optymalizacji, lub odwrotnie, optymalizować wyłącznie wybrane współrzędne. Ma to na celu znalezienia wspólnych cech serii analizowanych układów i zrozumienie różnic pomiędzy nimi. Wtedy poszczególne cechy geometryczne struktury mają swoje odbicie w postaci współrzędnych i ich wkładów w macierz PED. Należy tu podkreślić, że zmiana jednej współrzędnej rzutuje na wkłady PED innych współrzędnych i zachodzi potrzeba ponownej optymalizacji układu.

Poniżej omawiam szczegółowe zastosowania tej innowacji:

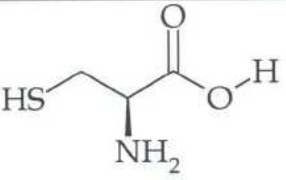
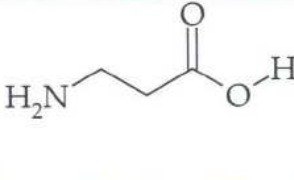
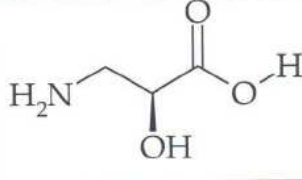
2.6.1. Halogenouracyle [H6]

5-Podstawione uracyle w tym 5-halogenouracyle (Schemat 2) były badane w naszym zespole w drugiej połowie lat 90. [17-21]. Zebrane doświadczenie i nowe możliwości obliczeniowe, takie jak szansa obliczenia anharmonicznych częstości drgań i wyznaczenie rezonansów Fermiego, skłoniły nas do podjęcia pełnej analizy widm matrycowych 5-halogenouracyli w roku 2004. Dla serii pozornie prostych 12 atomowych molekuł $C_4N_2O_2H_3X$, $X=F, Cl, Br, I$, analiza widm eksperymentalnych sprawiała duże trudności. Związane było to ze zmianą atomu halogenu i powodowaną w związku z tym zmianą wielu sprzężeń wewnątrz molekularnych. Zmiana sprzężeń wynikała zarówno ze zmiany masy atomu X , jak i zmiany jego elektroujemności i struktury elektronowej. Analiza PED z wyizolowaniem w układzie SBT drgania rozciągającego $C-X$, drgań zginających $C-C-X$, $C=C-X$ oraz drgania torsyjnego $CCCX$ pozwoliło na systematyczną analizę 5-halogenouracyli i przypisanie różnic ich widm w matrycach niskotemperaturowych różnicom fragmentów związanych z atomem halogenu [H6].



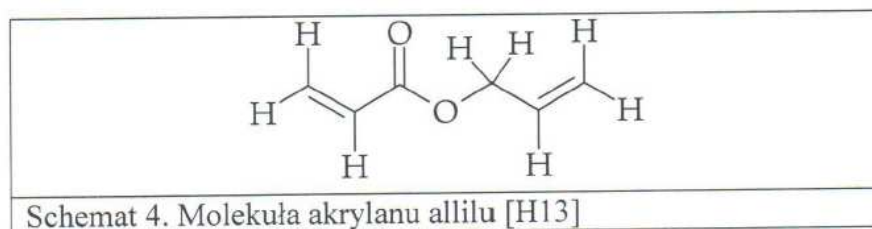
2.6.2. Konformery [H9, H12-H14]

Możliwości współczesnej chemii obliczeniowej pozwalają na badanie molekuł giętkich, w których rotacja wokół wiązań pojedynczych może prowadzić do współwystępowania bardzo wielu konformerów. Od 2006 roku we współpracy z prof. Joanną Sadlej z Wydziału Chemii UW i prof. Robertem Kołosem z Instytutu Chemii Fizycznej PAN badałem wraz z zespołem prof. Jana Cz. Dobrowolskiego z Instytutu Chemii Przemysłowej widma IR aminokwasów, (L-cysteiny [H9], β -alaniny [H12] i L-izoseryny [H14], Schemat 3) w matrycach niskotemperaturowych. Małe molekuly cysteiny, β -alaniny i izoseryny mają po kilkadziesiąt konformerów obojętnych - odpowiednio 50, 18 i 54. W każdym wypadku kilka z nich ma na tyle niską swobodną entalpię Gibbsa, że wszystkie muszą być uwzględnione w interpretacji widma IR w matrycy niskotemperaturowej. Należy pamiętać o tym, że aminokwasy przed depozycją w matrycy są odparowywane i skład konformacyjny matrycy odzwierciedla skład pary.

		
L-cysteina [H9]	β -alanina [H12]	L-izoseryna [H14]
Schemat 3. Trzy badane aminokwasy		

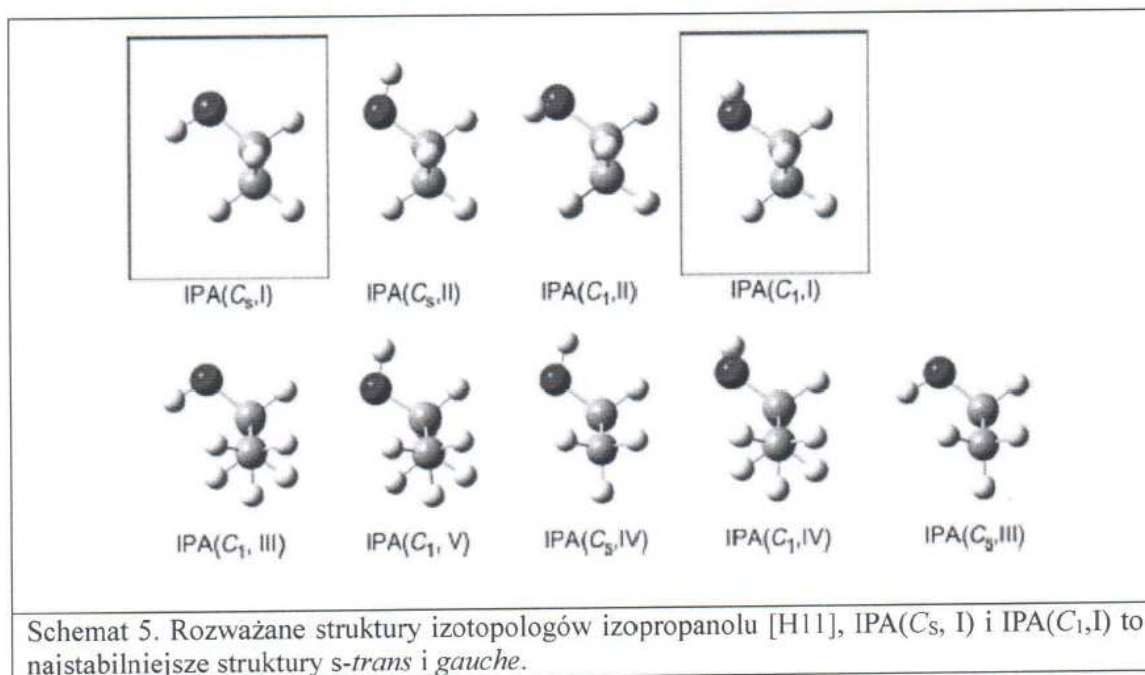
Struktury konformerów aminokwasów różnią się przede wszystkim układem wewnątrzmolekularnych wiązań wodorowych, które rzutują bardzo na kształt widma w matrycy. Są to wiązania $\text{COOH}\dots\text{NH}_2$, $\text{HNH}\dots\text{O}=\text{C}$, $\text{HNH}\dots\text{OH}$, $\text{OH}\dots\text{SH}$, $\text{SH}\dots\text{NH}_2$, a w izoserynie także $\text{OH}_{\text{alif}}\dots\text{NH}_2$, $\text{OH}_{\text{alif}}\dots\text{O}=\text{C}$ oraz $\text{OH}_{\text{alif}}\dots\text{OH}_{\text{karboksyl}}$. Na widmo IR wpływa także konformacja szkieletu. Wszystkie te czynniki powodują, że wyłonienie cech wspólnych i cech różnicujących widma IR konformerów jest kluczowe, a bez precyzyjnej analizy PED praktycznie niemożliwe. Analiza taka staje się łatwiejsza wtedy, gdy użytkownik programu VEDA może zdefiniować współrzędne SBT nazywane "User", które dla całego zestawu konformerów są identyczne i nie zmieniają się w trakcie innych operacji realizowanych przez program. Dzięki mojej analizie PED za pomocą programu VEDA pokazaliśmy, że w przypadku każdego badanego aminokwasu inny zakres widma jest najlepszy do przypisania pasm i identyfikacji konformerów. W wypadku matrycowego widma IR cysteiny jest to przede wszystkim zakres pasm drgań rozciągających SH ok 2600 cm^{-1} i $\text{C}=\text{O}$ ok 1750 cm^{-1} [H9], w wypadku widma β -alaniny jest to zakres *finger-print* od 660 do 460 cm^{-1} [H12] a w widmie izoseryny jest to zakres drgań rozciągających C-O od ok. 1200 do 1000 cm^{-1} [H14].

Innym przykładem pokazującym zastosowanie programu VEDA do określenia składu konformacyjnego na podstawie widm IR była analiza widm teoretycznych i eksperymentalnych ciekłego akrylanu allilu ([H13], Schemat 4). Analiza stabilności akrylanu allilu pokazała, że dominujące w mieszaninie równowagowej są dwa konformery *s-cis*. Znajduje to potwierdzenie w widmach oscylacyjnych ciekłego akrylanu allilu. Na podstawie analizy PED obliczonych widm, harmonicznym i anharmonicznym, dziesięciu konformerów *s-cis* i *s-trans* akrylanu allilu wykazałem, że pasma związane z drganiami rozciągającymi C-O sprzężonymi z drganiami $\text{C}=\text{C}$ położone przy ok. 1270 i 1260 cm^{-1} świadczą o obecności konformerów *s-trans* akrylanu allilu. Natomiast pasmo drgań o tym samym charakterze położone przy 1190 cm^{-1} odpowiada konformerom *s-cis*. Podobnie inne drgania fragmentu C-O absorbują przy 1050 cm^{-1} w konformerach *s-trans*, natomiast przy 970 cm^{-1} w konformerach *s-cis*.



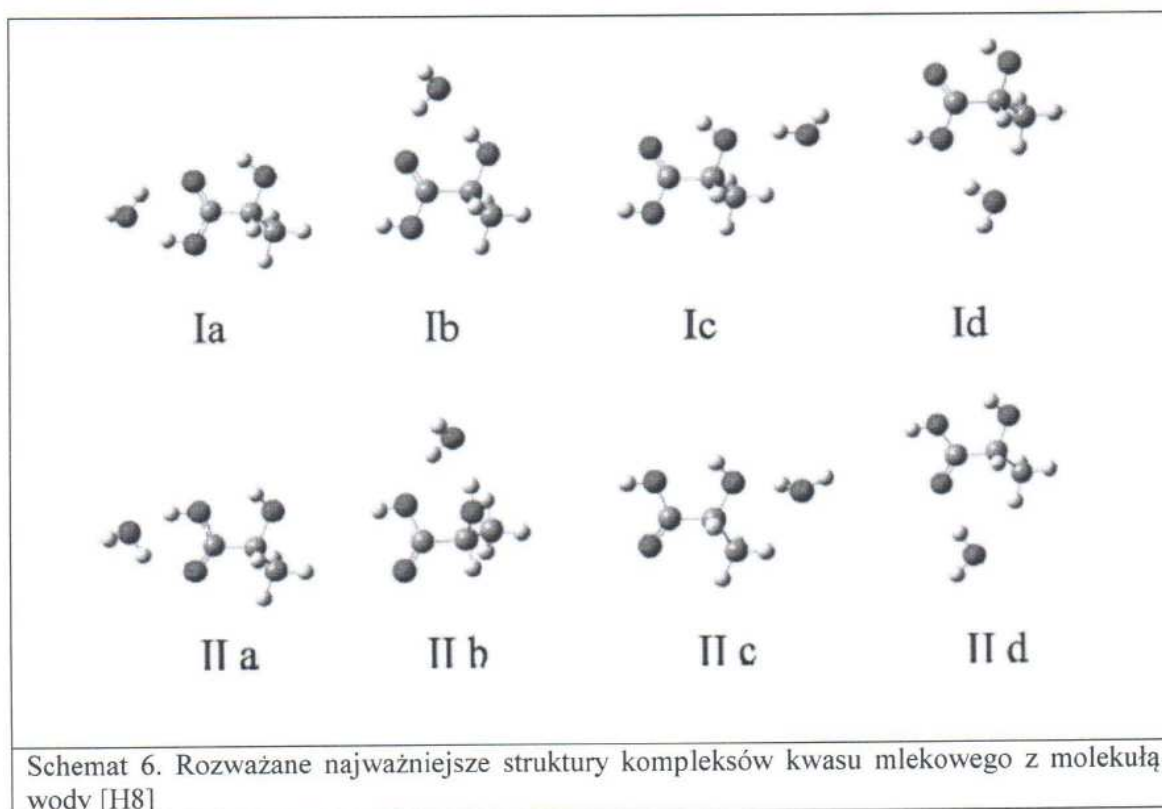
2.6.3. Widma izotopologów [H11]

W czasach, gdy obliczenia teoretyczne były niewiarygodne, podstawienie izotopowe służyło w spektroskopii oscylacyjnej do zwiększenia wiarygodności przypisań pasm drganiom. Obecnie, jakość obliczeń zależy przede wszystkim od mocy komputera, do którego ma się dostęp. Jednak nadal istnieją obszary widma, które bez pomocy podstawienia izotopowego trudno jest zinterpretować. W wypadku małej molekuly izopropanolu jest to obszar drgań rozciągających C-H, w którym występują liczne rezonanse Fermiego, które mogliśmy badać za pomocą obliczonych anharmonicznych widm IR. W pracy [H11] badaliśmy widma IR w matrycach niskotemperaturowych pozwalających na bezpośrednie porównanie widm obliczonych i doświadczalnych. Porównywaliśmy dwa rotamery 2-propanolu: *trans* i *gauche* oraz ich izotopologi: OD, D7 i D8 (Schemat 5). Obecność płaszczyzny symetrii wpływa znacznie na drgania oscylacyjne, współrzędne SBT i przypisania na podstawie analizy PED. Dla porównania badanych struktur przeprowadziłem analizę PED niezależnie dla każdej z nich, a następnie poszukiwałem cech wspólnych i różnic. Po zaaprobowaniu cech wspólnych, deklarowałem określone współrzędne, jako należące do kategorii „User” i ponownie prowadziłem optymalizację z wykluczeniem tych współrzędnych. W wyniku szczegółowej analizy wykazaliśmy, że w matrycach niskotemperaturowych istnieje jedynie forma *gauche*, co najprawdopodobniej wynika z wymuszenia asymetrii molekuly poprzez materiał matrycy.



2.6.4. Widma kompleksów międzymolekularnych z wodą [H8, H10]

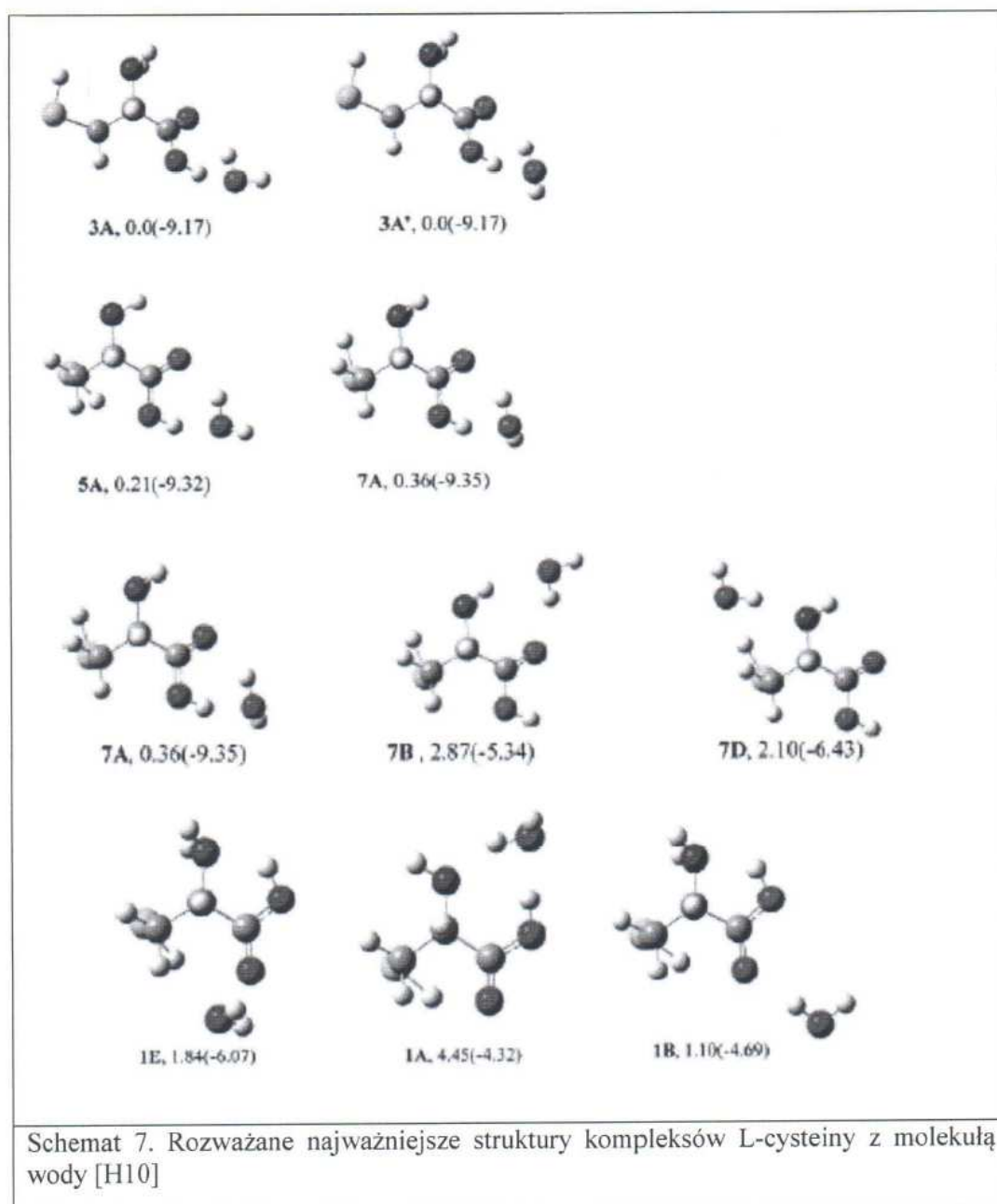
Pozornie konformery powinny mieć bardzo podobne widma. W fazie ciekłej szerokie pasma IR lub Ramana na ogół nie pozwalają na przypisanie udziału konformerów. Jednak zastosowanie techniki widm w matrycach niskotemperaturowych powoduje tak duże zwężenie pasm, że analiza wkładu poszczególnych konformerów w widmo staje się wykonalna. W 2004 roku Borba i wsp. opublikowali widmo IR kwasu mlekowego w matrycach temperaturowych pokazując nie tylko obecność dwóch dominujących konformerów, ale i dwóch innych konformerów o bardzo małej zawartości [23]. Rok później nasz zespół opisał symulację widma VCD kwasu mlekowego, który jest molekułą chiralną, pokazującą jak zmiany konformacyjne oraz tworzenie kompleksów z jedną molekułą wody wpływa na widmo VCD. W tym celu konieczna była bardzo szczegółowa analiza PED zarówno konformerów kwasu mlekowego jak i jego kompleksów z wodą.



Widma poszczególnych konformerów różnią się między sobą z powodu tworzenia dwu różnych wewnętrznych wiązań wodorowych grupy OH w położeniu „a” względem grupy karboksylowej. Wiązania wodorowe mogą tworzyć się zarówno z atomem tlenu grupy C=O jak i grupy OH z fragmentu karboksylowego. Istnieją także konformery, w których wewnętrzne wiązanie wodorowe jest zerwane. Te pozornie małe zmiany strukturalne powodują poważne zmiany w widmach IR i VCD, dlatego, że wpływ wiązań wodorowych na

widma oscylacyjne jest ogromny. Sytuacja komplikuje się bardzo znacznie wtedy, gdy pojawiają się dodatkowe oddziaływania z wodą, mogącą być zarówno donorem atomu H, jak i jego akceptorem (Schemat 6). Wyłonienie w tych układach wspólnych cech strukturalnych dających jednolity wkład w widmo oscylacyjne ma fundamentalne znaczenie dla poprawnej analizy spektroskopowej układu. Taka analiza jest możliwa dzięki wykorzystaniu kategorii "User". Analizę opisałem w pracy [H8] i udokumentowałem w materiałach uzupełniających tą pracę.

W innej pracy badaliśmy widma teoretyczne VCD L-cysteiny kompleksowanej przez jedną molekułę wody [H10].



Takie kompleksy można obserwować w matrycach niskotemperaturowych, ale technika matrycowych widm VCD należy jeszcze do rzadkości. Spośród ok. 40 kompleksów 1:1 wyłonione zostały trzy grupy, dla których analizowane były głównie pasma $\nu(\text{OH})$ i $\nu(\text{NH})$ oraz $\beta(\text{NH}_2)$ i $\beta(\text{H}_2\text{O})$. Wykazaliśmy, że widmo VCD jest bardzo wrażliwe na zmiany konformacyjne i zmianę miejsca i typ kompleksu z molekułą wody. Woda może być zarówno donorem jak i akceptorem wodoru, a molekula cysteiny może być akceptorem wodoru poprzez grupy $\text{C}=\text{O}$, OH , NH_2 i SH oraz donorem protonu poprzez grupy OH , NH_2 i SH . Możliwych jest też kilka kompleksów cyklicznych, w których obie molekuly są równocześnie donorem i akceptorem protonu. W tak skomplikowanej sytuacji wyłonienie wspólnych drgań za pomocą kategorii "User" pozwoliło ogarnąć złożoność widma VCD i zaproponować spójną interpretację.

3. Schemat blokowy programu VEDA [H1]

Schemat blokowy (rys. 1) specyfikuje dane wejściowe, prezentuje operacje wstępne, proces optymalizacji i operacje końcowe. Dane wejściowe niezbędne dla programu VEDA to: współrzędne kartezjańskie atomów oraz kartezjańskie stałe siłowe. Pożądanymi danymi są obliczone częstości drgań oraz macierz wychyleń atomów (ADM). Dane te są automatycznie ekstrahowane z plików wyjściowych programu Gaussian. Jeżeli dane te są formalnie poprawne, program VEDA generuje własny format danych (plik .fmv), który jest wystarczający przy następnych uruchamianiach programu. Następnym krokiem jest generowanie macierzy połączeń atomów (plik .mpo) i układ współrzędnych SBT (plik .dd2). Program VEDA dopuszcza w tym miejscu ingerencję użytkownika, który może wprowadzić własne definicje współrzędnych (plik .dd2) i/lub macierz połączeń. Zmiana macierzy połączeń będzie implikować zmiany w generowanym pliku .dd2.

3.1. Wstępna generacja współrzędnych złożonych

Na podstawie geometrii układu i macierzy połączeń program VEDA generuje układ współrzędnych złożonych, gdzie pogrupowane są podobne współrzędne. Ma to na celu zachowanie symetrii układu. Warto pamiętać, że późniejsze operacje następujące w procesie optymalizacji są nieprzemienne i dlatego punkt startowy nie jest bez znaczenia. Jednakże można ten krok pominąć, np. dla prostych układów lub gdy występują kłopoty z liniową niezależnością współrzędnych.

3.2. Optymalizacja, w tym: procedura ADM, redukcja i normalizacja [H1 - H15]

Wszystkie stadia procesu optymalizacji mogą być włączane i wyłączane interaktywnie. Gdy program przystępuje do wykonania kolejnego etapu, sprawdza czy jest on aktywny. W procesie optymalizacji podstawowym krokiem jest zastępowanie wybranych współrzędnych ich sumą i różnicą (kierując się macierzą PED). Kryterium oceniającym postęp optymalizacji jest wartość parametru EPM, zdefiniowanego, jako średnia [%] z maksymalnych wartości dla wszystkich kolumn (reprezentujących współrzędne) macierzy PED. Najpierw przetwarzane są współrzędne S (osobno w kategoriach CH i not CH, gdy jest tak zadane), następnie, w podobny sposób B, na końcu T. Gdy liczba zmian i zmiana wartości parametru EPM jest

znacząca, następuje powrót do początku. Do tego procesu mogą być włączone współrzędne alternatywne. Utworzone współrzędne złożone są wstępnie redukowane (tzn. usuwane są te składowe, które nie wpływają na zwiększenie wartości parametru EPM). Poszczególne składowe współrzędnych złożonych mogą mieć niejedynkowe współczynniki oznaczające ich wagi. W początkowych stadiach optymalizacji wagi (± 1) są preferowane. Najpierw prowadzona jest optymalizacja wstępna z pominięciem już dobrze zdefiniowanych współrzędnych, następnie może być zastosowana optymalizacja udokładniona - już z udziałem współrzędnych, dla których PED przekracza 75%.

Ważnym elementem procesu optymalizacji jest procedura ADM. Procedura ta wykorzystuje macierz wychyleń (zmiany położenia atomów) dla poszczególnych drgań, uzyskiwana z danych wyjściowych programu Gaussian. Na podstawie tej macierzy program VEDA konstruuje dodatkowy zbiór współrzędnych, którymi można zastępować sukcesywnie już istniejące współrzędne. Jednakże w wyniku konstruowania układu współrzędnych wyłącznie na podstawie tego zbioru uzyskuje się bardzo rozbudowane (trudne do zredukowania) współrzędne, gdyż nie każda zmiana położenia atomów wpływa znacząco na zmianę energii potencjalnej. Z tego powodu procedura ADM nie powinna być zastosowana od samego początku, a raczej użyta w kolejnym uruchomieniu programu VEDA. Zastosowanie procedury ADM daje przyczynek ok. 10% do wartości EPM.

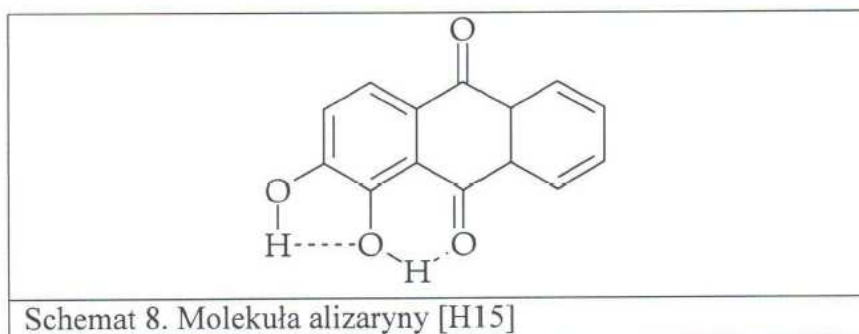
Proces optymalizacji kończą normalizacja i redukcja współrzędnych. Normalizacja polega na próbie ustalenia wag (± 1) dla kolejnych współrzędnych bez znacznego zmniejszenia parametru EPM, a redukcja na usunięciu nadmiarowych składowych ze współrzędnych złożonych dopuszczając nieznaczne zmniejszenie EPM. Po zakończeniu procesu optymalizacji uzyskuje się wartość parametru EPM w granicach 50 – 80 %. Około połowa drgań opisana jest jedną współrzedną, ok 40% drgań opisywanych jest dwoma lub trzema współrzednymi, co wynika z faktu, że rozgraniczone są współrzedne S, B i T oraz CH i not CH. Niespełna 10% drgań rozmytych jest na całą molekulę i opisywanych wieloma współrzednymi, niemniej jednak definicje tych współrzednych muszą być formalnie poprawne – ich rolą jest nie szkodzić definicjom innych współrzednych.

Zastosowanie procesu optymalizacji opisałem w [H1]. Wykorzystanie optymalizacji miało miejsce w analizie PED w pracach [H2–H15], w tym zastosowanie procedury ADM w pracach [H1, H5–H15].

3.2.1 Przykładowe zastosowanie optymalizacji. Analiza PED widma alizaryny [H15].

W pracy opisującej strukturę krystalograficzną i spektroskopię barwnika organicznego, alizaryny (Schemat 8), obliczyliśmy metodą DFT teoretyczne, oscylacyjne widma harmoniczne i anharmoniczne, monomeru alizaryny i porównaliśmy je z widmami eksperymentalnymi IR i Ramana, zdając sobie sprawę, że widma eksperymentalne dotyczą form polikrystalicznych. Oprócz spodziewanych różnic dotyczących pasm OH oraz jednego z pasm C=O, grupy zaangażowanej w międzymolekularne wiązanie wodorowe, widma eksperymentalne wykazały bardzo dobrą zgodność z obliczonymi widmami teoretycznymi. Zgodność ta upoważniła nas do przeprowadzenia wiarygodnej analizy PED w celu

wyjaśnienia widm eksperymentalnych. Widmo alizaryny składa się z 72 drgań. Dla startowego układu współrzędnych uzyskałem wartość parametru EPM poniżej 30 %. Zaledwie dla kilku drgań osiągnięto wartość PED powyżej 50 %. Po wstępnej optymalizacji wartość parametru EPM wzrosła do ponad 50 %, a po zastosowaniu procedury ADM wzrosła do ponad 60 % i zaledwie dla kilku drgań wartość PED nie przekraczała 40 %. Wykonana przeze mnie analiza PED pozwoliła na przypisanie wszystkich pasm z zakresu poniżej 1650 cm^{-1} . Nie byłoby to możliwe jedynie na podstawie wiedzy eksperymentalnej, szczególnie dla drgań zginających i torsyjnych.



3.3. Edycja współrzędnych, procedura "step-by-step", kilkukrotna optymalizacja

Następny etap należy do użytkownika programu. Powinien on krytycznie spojrzeć na uzyskany zbiór współrzędnych pod kątem ich czytelności i zrozumiałości. Czasami użytkownik może chcieć uwypuklić symetrię molekuły, znaleźć wspólne cechy porównywanych kilku układów, potraktować, jako odrębne współrzędne opisujące wybrane grupy funkcyjne (np. C=O), wyeksponować współrzędne opisujące drgania międzymolekularne, itp. Wprowadzone zmiany na ogół prowadzą do zmniejszenia wartości parametru EPM i należy to kontrolować sukcesywnie w trakcie edycji współrzędnych. Po zakończeniu tego procesu należy ponownie optymalizować zbiór współrzędnych. Ażeby zachować wprowadzone zmiany, trzeba zdefiniować kategorię „User” w pliku .dd2 i wyspecyfikować, które współrzędne mają do niej należeć. W następnych etapach użytkownik deklaruje, które współrzędne mają być wyłączone z optymalizacji (np. "User", CH, itd.), lub odwrotnie: wskazuje podzbiór do dalszej optymalizacji.

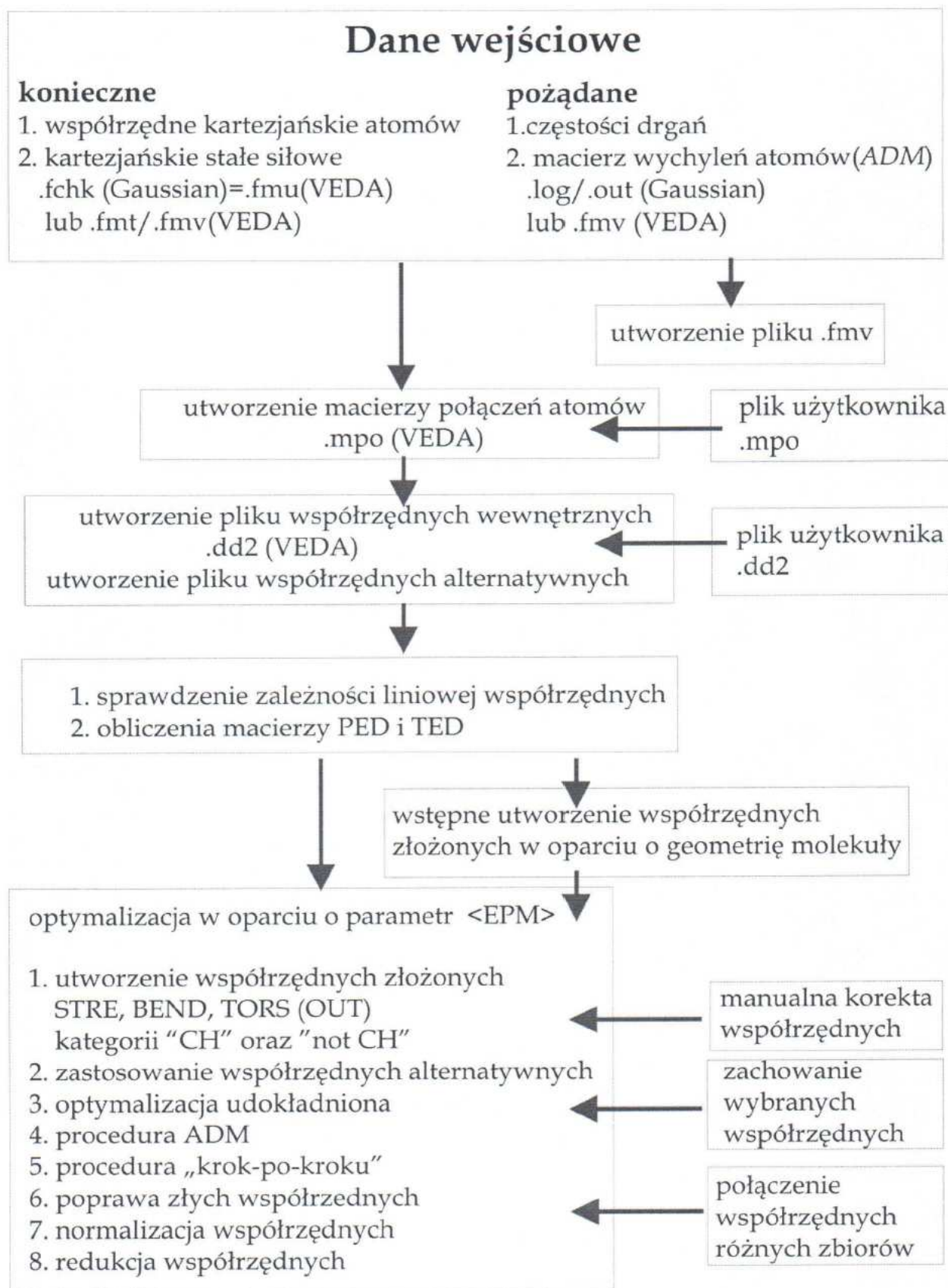
Typ definicji współrzędnych nie jest jednoznaczny, szczególnie dla drgań z zakresu *fingerprint* (1400-400 cm^{-1}). Niektóre z drgań mogą być opisane ruchami atomów ciężkich lub CH, albo (częściej) drganie może być opisana współrzędną typu B lub T. Użytkownik może wybrać swój sposób zdefiniowania określonej współrzędnej z zastosowaniem procedury "step-by-step". Wiąże się to jednak ze zmniejszeniem wartości parametru EPM, przynajmniej w początkowej fazie. Niemniej jednak warto zaznaczyć, że ta część jest przeznaczona dla użytkownika mającego dużą wiedzę z zakresu interpretacji widm oscylacyjnych. Mało zaawansowany użytkownik może zdać się wyłącznie na automatyczną analizę programu

VEDA.

W większości wypadków, nie należy poprzestawać na jednokrotnej optymalizacji. Jak wspomniano wcześniej, procedurę ADM warto jest zastosować dopiero w drugim lub trzecim cyklu. Również, przykładowo, redukcja współrzędnych może przyczynić się do powstania nowych sposobów kreowania współrzędnych złożonych. Powyżej opisany sposób analizy PED z zastosowaniem programu VEDA powstał na podstawie prac opisanych w [H1 – H15].

4. Granice stosowania programu VEDA

Ze wzrostem liczby atomów coraz trudniej jest przeprowadzić analizę PED. Rośnie krotność (liczba składowych) współrzędnych złożonych, maleje wartość parametru EPM, zwiększa się liczba drgań rozmytych na całą molekułę, coraz trudniej jest ogarnąć cały układ i, dodatkowo, czas obliczeń rośnie potęgowo. Największe układy opublikowane z moim udziałem to molekuły ponad 90 atomowe [15, 16]. Granice stosowności programu ustaliłem na 120 atomów, lecz, ze względu na zainteresowanie użytkowników ze społeczności międzynarodowej, zwiększyłem ją do 240 (VEDAxl) i 480 atomów (VEDAxxl). Największe układy obliczane przeze mnie to 200 atomowe molekuły (jeszcze nieopublikowane).



Rys. 1. Schemat blokowy programu VEDA

5. Wnioski

Podstawowym celem mojej pracy badawczej była interpretacja teoretycznych widm oscylacyjnych pozwalająca na interpretację widm eksperymentalnych molekuł 50 i więcej atomowych. Na świecie powszechnie stosuje się interpretację opartą na analizie (wizualizacji) wychyleń atomów w danym drganiu. Metoda ta jest błędna z punktu widzenia energii drgań fragmentów, gdyż ignorowana jest macierz stałych siłowych. Analiza PED uwzględnia zarówno wychylenia atomów jak i stałe siłowe, czyli energię danego drgania. Trudnością analizy PED jest przedstawienie układu współrzędnych normalnych poprzez układ współrzędnych lokalnych opisujących drgania poszczególnych fragmentów molekuly. Manualna konstrukcja takiego układu współrzędnych lokalnych jest praktycznie możliwa dla molekuł około 20-atomowych. Dla większych molekuł problem staje się kombinatorycznie bardzo złożony. Co więcej, drgania fragmentów molekuly są ze sobą sprzężone, co wymaga użycia superpozycji wielu współrzędnych lokalnych.

W mojej pracy badawczej udoskonaliłem interpretację teoretycznych widm oscylacyjnych za pomocą metody PED ujętej w moim programie VEDA. Podstawą innowacją wprowadzoną przeze mnie była automatyczna konstrukcja niezależnych liniowo układów współrzędnych lokalnych. Program automatycznie buduje także złożone współrzędne, które najlepiej oddają drgania normalne. Dzięki programowi VEDA umożliwiłem interpretację drgań molekuł średniej wielkości o znacznie większym praktycznym znaczeniu dla chemii. Generalnie analiza PED nie jest jednoznaczna, a interpretacja PED jest wtedy dobra, kiedy pozwala dobrze zrozumieć badane zjawisko. Dlatego umożliwiłem interpretatorowi takie ujęcia problemu, aby najlepiej uwidocznili badany efekt spektroskopowy. Wreszcie ostatecznym celem dobrej interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych jest zawsze jak najdokładniejsza interpretacja widm doświadczalnych. Program VEDA dobrze spełnia ten warunek.

Dzięki automatycznej generacji układu lokalnych współrzędnych w programie VEDA [H2] stała się możliwa analiza PED układów ponad 60 atomowych [H3, H4]. Wprowadzona przeze mnie optymalizacja analizy PED pozwoliła na uzyskanie najlepszego, a zarazem najprostszego rozwiązania problemu interpretacji widm oscylacyjnych molekuł [H1 - H15]. Jest to tym ważniejsze im większa jest molekula. W procesie optymalizacji uwzględniane są ruchy poszczególnych atomów (procedura ADM), a także redukcja i normalizacja współrzędnych. Wcześniej nikt takiej optymalizacji nie wykonywał. Rozłączenie drgań związanych tylko z fragmentami szkieletu, np. CC oraz grupami CH układów aromatycznych i alifatycznych pozwoliło uzyskiwać znacznie klarowniejszą interpretację widm dużych molekuł (np. alkiloaromatycznych) [H5, H7]. Wprowadzenie kategorii drgań "User" umożliwiło interpretatorowi wyselekcjonowanie drgań fragmentów specjalnie ważnych w rozwiązywaniu konkretnego problemu [H6, H8 - H14]. Na przykład porównanie widm teoretycznych szeregu 5-halogenouracyli pozwoliło na spójne przypisanie w widmach matrycowych drgań zginających C-C-X, C=C-X oraz drgania torsyjnego CCCX [H6]. Innym zastosowaniem kategorii "User" była spójna interpretacja teoretycznych widm IR wielu konformerów aminokwasów (L-cysteiny [H9], β -alaniny [H12] i L-izoseryny [H14]) służąca interpretacji złożonych widm IR tych aminokwasów w matrycach niskotemperaturowych. Kolejnym przykładem była analiza widm teoretycznych i eksperymentalnych ciekłego

akrylanu allilu mającego 10 podstawowych konformerów [H13]. Na podstawie analizy PED tych dziesięciu konformerów udało się przypisać pasma świadczące o obecności konformerów *s-trans* oraz *s-cis* akrylanu allilu. Następnym przykładem zastosowania analizy, w której kluczowe było zastosowanie kategorii "User" była analiza widm oscylacyjnych kompleksów międzymolekularnych konformerów kwasu mlekowego z wodą [H8] oraz kompleksów L-cysteiny z wodą [H10]. Prace te pozwoliły lepiej zrozumieć zjawisko transferu chiralności monitorowanego za pomocą widm VCD (*Vibrational Circular Dichroism*). Wreszcie kategoria "User" okazała się kluczowa w analizie widm matrycowych IR izotopologów izopropanolu [H11]. W wyniku analizy możliwe było wykazanie, że w matrycach niskotemperaturowych istnieje jedynie forma niesymetryczna molekuly izopropanolu. Cały program, łącznie ze schematem jego algorytmu i przykładami, opisałem w publikacji [H1].

Powstanie programu VEDA wynikało bezpośrednio z potrzeb Zespołu Modelowania Molekularnego. Jest on bardzo pomocny, wręcz nieodzowny w interpretacji oscylacyjnych widm teoretycznych, choć nie może w 100% zastąpić doświadczonego interpretatora. Był on zastosowany w ok. 30 opublikowanych pracach Zespołu [10-22]. Nabyte w trakcie stosowania programu doświadczenia implikowały wielokrotną modyfikację i jego udoskonalania. W ostatnich latach program VEDA został udostępniony społeczności międzynarodowej. Jest wykorzystywany w laboratoriach w Europie (Polska, Rosja, Ukraina, Hiszpania, Francja), Azji (Turcja, Indie, Chiny, Iran), Afryce (Tunezja, Egipt, Algieria, RPA) i Ameryce (Kanada, USA). Zaowocowało to już ponad 200 niezależnymi cytowaniami programu.

Michał Jamroz

Literatura - Prace będące podstawą rozprawy habilitacyjnej

- H1 M. H. Jamróz (100%), **Vibrational energy distribution analysis (VEDA): Scopes and limitations**, *Spectrochim Acta A*, 114 (2013) 220–230.
- H2 M.H. Jamróz (80%), J. Cz. Dobrowolski (20%), **Potential Energy Distribution Analysis (PED) of DFT Calculated IR Spectra of the most Stable Li, Na, Cu(I) Diformate Molecules**, *J. Mol. Struct.*, 565-566(2001)475-480.
- H3 M. H. Jamróz (80%), J. Cz. Dobrowolski (10%), J. E. Rode (5%), M. A. Borowiak (5%), **Theoretical and Experimental IR Spectra and Stability of Dibenzyl Carbamic Acid Dimer**, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 618(1-2) (2002)101-108.
- H4 M. H. Jamróz (70%), J. Cz. Dobrowolski (30%), **Theoretical IR Spectra and Stability of Carbamic Acid Complexes**, *Vib. Spectry*, 29(2002)217-221.
- H5 M. H. Jamróz (75%), R. Brzozowski (10%), J. Cz. Dobrowolski (15%), **Search for IR spectral features of less-abundant diisopropylnaphthalenes based on comparison of theoretical and experimental spectra**, *Spectrochim. Acta A. Mol. Biomol. Spectr.* 60(2004)371-375.
- H6 J. Cz. Dobrowolski (25%), J. E. Rode (20%), Robert Kołos (20%), M. H. Jamróz (25%), K. Bajdor (5%), A. P. Mazurek (5%), **Ar-matrix IR Spectra of 5-Halouracils Interpreted by Means of DFT Calculations**, *J. Phys. Chem.*, 109(2005)2167-2182.
- H7 M. H. Jamróz (70%), J. Cz. Dobrowolski (10%), R. Brzozowski (20%), **Vibrational Modes of 2, 6-, 2, 7-, and 2, 3-Diisopropylnaphthalene. A DFT Study**, *J. Mol. Struct.*, 787(2006)172-183.
- H8 J. Sadlej (25%), J. Cz. Dobrowolski (25%), J. E. Rode (25%), M. H. Jamróz (25%), **DFT study of vibrational circular dichroism spectra of D-lactic acid-water complexes**, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 8(2006)101-113.
- H9 J. Cz. Dobrowolski (20%), M. H. Jamróz (20%), R. Kołos (20%), J. E. Rode (20%), J. Sadlej (20%), **Theoretical prediction and the first IR-matrix observation of several L-cysteine molecule conformers**, *ChemPhysChem.*, 8(2007)1085-1094.
- H10 J. Sadlej (25%), J. Cz. Dobrowolski (25%), J. E. Rode (25%), M. H. Jamróz (25%), **Density Functional Theory Study on Vibrational Circular Dichroism as a Tool for Analysis of Intermolecular Systems: (1:1) Cysteine-Water Complex Conformations**, *J. Phys. Chem. A*, 111(2007)10703-10711.
- H11 J. Cz. Dobrowolski (15%), S. Ostrowski (15%), R. Kołos (30%), M. H. Jamróz (40%), **Ar-Matrix IR Spectra of 2-Propanol and its OD, D7 and D8 Isotopologues**, *Vib. Spec.*, 48(2008)82-91.
- H12 J. Cz. Dobrowolski (15%), M. H. Jamróz (30%), R. Kołos (20%), J. E. Rode (15%), J. Sadlej (20%), **IR low-temperature matrix and *ab initio* study on β -alanine conformers**, *ChemPhysChem.*, 9(2008) 2042-2051.
- H13 M. H. Jamróz (20%), M. E. Jamróz (20%), J. E. Rode (20%), E. Bednarek (20%), J. Cz. Dobrowolski (20%), **Interpretation of Vibrational and NMR Spectra of Allyl Acrylate. An Evidence for Several Conformers**, *Vib. Spec.* 50 (2009) 231–244.
- H14 J. Cz. Dobrowolski (10%), M. H. Jamróz (25%), Robert Kołos (25%), J. E. Rode (5%), M. K. Cyrański (25%), J. Sadlej (10%), **IR low-temperature matrix, X-ray and *ab initio* study on L-isoserine conformations**, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 12(2010) 10818–10830.
- H15 M. K. Cyrański (10%), M. H. Jamróz (20%), A. Ryguła (10%), J. Cz. Dobrowolski (10%), Ł. Dobrzycki (25%), M. Barańska (25%), **On Two Alizarin Polymorphs**, *CrystEngComm*, 14(2012)3667-3676.

Literatura uzupełniająca

- [1] Y. Morino, K. Kuchitsu, **A note on the classification of normal vibrations of molecules**, *J. Chem. Phys.* 20 (1952) 1809–1810.
- [2] W.J. Taylor, **Distribution of kinetic and potential energy in vibrating molecules**, *J. Chem. Phys.* 22 (1954) 1780–1781.
- [3] T. Miyazawa, T. Shimanouchi, S. Mizushima, **Normal vibrations of N-methylacetamide**, *J. Chem. Phys.* 29 (1958) 611–616.
- [4] G. Zerbi, J. Overend, B. Crawford, **Urey—Bradley force constants of methanol**, *J. Chem. Phys.* 38 (1963) 122–127.
- [5] G. Keresztury, G. Jalsovszky, **Alternative calculation of vibrational potential energy distribution**, *J. Mol. Struct.* 10 (1971) 304.
- [6] P. Pulay, G. Fogarasi, F. Pang, J.E. Boggs, **Systematic ab initio gradient. Calculation of molecular geometries, force constants, and dipole moment derivatives**, *J. Am. Chem. Soc.* 101 (1979) 2550–2560.
- [7] L. Lapinski, P. Pongor, **PED-program**, Warsaw, 1994
- [8] L. Lapinski, M.J. Nowak, **BALGA – Computer Program for PED Calculation**, Institute of Physics Polish Academy of Sciences, Warsaw.
- [9] J. Cz. Dobrowolski (40%), M. H. Jamróz (20%), J. K. Kazimirski (10%), K. Bajdor (10%), M. Borowiak (10%), R. Larsson (10%), **Theoretical Spectra of Diformates: Diformate Anion**, *J. Mol. Struct.* 482-483(1999)183-187.
- [10] M. H. Jamróz (50%), J. Cz. Dobrowolski (30%), M. Borowiak (20%), **The CO₂ with dimethylamine reaction: ab initio predicted spectra**, *J. Mol. Struct.*, 482-483(1999)633-637.
- [11] J. Cz. Dobrowolski (40%), M.H. Jamróz (40%), M. A. Borowiak (10%), E. Quaranta (5%), M. Aresta (5%), **Theoretical IR and Raman Spectra of Diketene and its 3-Methylene Isomer**, *Vib. Spectry*, 22(2000)19-28.
- [12] J. Rode (50%), J. Cz. Dobrowolski (30%), M. H. Jamróz (10%), M. A. Borowiak (10%), **Theoretical Vibrational Spectra of the Diketene, its Isomers, and their Mono- and Disulphur Analogues**, *J. Mol. Struct.*, 565-566(2001)433-438.
- [13] J. Rode (50%), J. Cz. Dobrowolski (30%), M. H. Jamróz (10%), M. A. Borowiak (10%), **Theoretical Vibrational and NMR Spectra of 1,2- and 1,3-dimethylenecyclobutane Molecules**, *Vib. Spectrosc.*, 25(2001)133-149.
- [14] J. E. Rode, J. Cz. Dobrowolski, **Chiral Allenes: Theoretical VCD and IR Spectra**, *J. Mol. Struct. (Theochem)*, 635(2003)151-159.
- [15] Marta K. Jamróz (70%), Michał H. Jamróz (15%), Jan Cz. Dobrowolski (5%), Jan A. Gliński, Michał Gleńsk, **One new and six known triterpene xylosides from *Cimicifuga racemosa*: FT-IR, Raman and NMR studies and DFT calculations**, *Spectrochim. Acta A*, 93(2012)10-18.
- [16] M. K. Jamróz (70%), M. H. Jamróz (15%), J. Cz. Dobrowolski (10%), J. A. Gliński, M. H. Davey, I. Wawer, **Novel and unusual triterpene from Black Cohosh. Determination of structure of 9,10-seco-9,19-cyclolanostane xyloside (cimipodocarpaside) by NMR, IR and Raman spectroscopy and DFT calculations**, *Spectrochim. Acta A*, 78 (2011) 107–112.
- [17] J. Cz. Dobrowolski, R. Kołos, J. Sadlej, A. P. Mazurek, **Theoretical and IR-matrix isolation studies on the urea and urea-D₄, -¹³C, and -1,3-¹⁵N₂ substituted molecules**, *Vib. Spectry*, 29(2002)261-282.
- [18] Z. Zwierzchowska, K. Dobrosz-Teperek, W. Lewandowski, R. Kołos, K. Bajdor, J. Cz.

- Dobrowolski, A. P. Mazurek, **Vibrational spectra of 5-halogenouracils: Part I.** *J. Mol. Struct.*, 410(1997)415-420.
- [19] K. Dobrosz-Teperek, Z. Zwierzchowska, W. Lewandowski, K. Bajdor, J. Cz. Dobrowolski, A. P. Mazurek, **Vibrational spectra of 5-halogenouracils: Part II - Solids.** *J. Mol. Struct.*, 470(1998)115-125.
- [20] E. Bednarek, J. Cz. Dobrowolski, K. Dobrosz-Teperek, J. Sitkowski, L. Kozerski, W. Lewandowski, A. P. Mazurek, **Theoretical and Experimental ^1H , ^{13}C , ^{15}N , and ^{17}O NMR Spectra of 5-Nitro, 5-Amino, and 5-Carboxy Uracils,** *J. Mol. Struct.*, 482-483(1999)333-337.
- [21] E. Bednarek, J. Cz. Dobrowolski, K. Dobrosz-Teperek, J. Sitkowski, L. Kozerski, W. Lewandowski, A. P. Mazurek, **The ^1H , ^{13}C , ^{15}N , and ^{17}O NMR Spectra of 5-Halogenouracils: Theoretical and Experimental Spectra,** *J. Mol. Struct.*, 554 (2000)233-243.
- [22] M. E. Jamróz, M. Jarosz, J. Witowska-Jarosz, E. Bednarek, W. Tęcza, M. H. Jamróz, J. Cz. Dobrowolski, J. Kijeński, **Mono-, di-, and tri-tertbutyl ethers of glycerol. A molecular spectroscopic study,** *Spectrochim. Acta, A*, 67(2007)980-988.
- [23] A. Borba, A. Gómez-Zavaglia, L. Lapinski, R. Fausto, Rotational isomers of lactic acid: first experimental observation of higher energy forms, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2004, 6, 2101-2108.