

UNIwersytet im. Adama Mickiewicza
Wydział Chemii
ul. Umultowska 89 B, 61-614 Poznań

Prof. dr hab. Marek Kręglewski
Zakład Chemii Teoretycznej

tel. 618291660, fax 618291659
e-mail: mkrreg@amu.edu.pl

Poznań, 16.10.2014

Ocena rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego
dr. Michała Jamroza

Uwagi ogólne

Dr Michał Jamróz uzyskał stopień magistra fizyki na Wydziale Mat-Fiz-Chem na Uniwersytecie Jagiellońskim w 1977 roku. Po studiach podjął pracę w Instytucie Chemii Przemysłowej. Tam też uzyskał w 1986 roku stopień doktora nauk technicznych za rozprawę „Algorytm rozpoznawania podstruktur w związkach organicznych metodą sztucznej inteligencji, na podstawie widm podczerwieni” pod kierunkiem prof. Zdzisława Hippego.

Dorobek naukowy dr Michała Jamroza dotyczy szeroko rozumianej spektroskopii w podczerwieni, zarówno w aspekcie badań doświadczalnych jak i teoretycznych.

Całkowity dorobek Habilitanta to 60 prac naukowych zarejestrowanych w Journal Citation Reports o łącznym Impact Factor 122 cytowanych 579 (bez autocytowań 485) razy do kwietnia 2014 roku. Od tego czasu liczba cytowań znacząco wzrosła, bowiem w 2014 roku prace Habilitanta były cytowane ponad 120 razy. W ostatnich 5 latach widoczny jest znaczący wzrost liczby cytowań, co wiąże się także z udostępnieniem międzynarodowej społeczności naukowej programu VEDA, który jest oryginalnym dziełem Habilitanta. Także indeks Hirscha, który obecnie wzrósł do $h=15$ świadczy o zauważeniu dorobku dr Michała Jamroza przez międzynarodową społeczność naukową.

Ocena rozprawy habilitacyjnej

Rozprawę habilitacyjną stanowi cykl 15 publikacji wyłącznie w czasopismach z bazy Journal Citation Reports o łącznym IF 37. Do prac dołączono wszystkie konieczne dokumenty, w tym autoreferat podsumowujący osiągnięcia naukowe autora zaprezentowane w cyklu publikacji i jednoznacznie wskazujący na zwartość tematyczną przedstawionych prac.

Nie budzą wątpliwości oświadczenia współautorów, którzy uzasadniają opisowo deklarowany procentowy wkład do poszczególnych publikacji. Prace badawcze, w których zaangażowany

był i jest Habilitant są w większości pracami zespołowymi, co utrudnia indywidualną ocenę osiągnięć naukowych. Nie ma wątpliwości, że Habilitant jest samodzielnym autorem programu VEDA, który umożliwia interpretację widm wibracyjnych badanych cząsteczek. Jedyną w zbiorze pracę monoautorską z 2013 roku jest właśnie poświęcona opisowi założeń teoretycznych, algorytmowi i sposobowi korzystania z programu VEDA. Oprócz tego w zbiorze 15 prac tylko w 5-ciu dalszych pracach udział Habilitanta przekracza 50%. Nie jest do końca jasne, jakie są Jego zamierzenia dotyczące dalszych badań, ponieważ prace, w których miał udział większościowy ukazały się w latach 2001, 2002, 2004 i 2006, a w późniejszym okresie Habilitant jest współautorem mniejszościowym z wyjątkiem wspomnianej pracy monoautorskiej.

Program VEDA jest niewątpliwym oryginalnym wkładem Autora do interpretacji widm w podczerwieni. Program pozwala na zdefiniowanie układu współrzędnych lokalnych (rozciągających, zginających i torsyjnych) dla dużych cząsteczek, ponad 120 atomowych. Jego olbrzymią zaletą jest interakcja z użytkownikiem, który może definiować własny zbiór współrzędnych lokalnych najbardziej przydatny dla badanego problemu. Program wspomaga użytkownika modyfikując współrzędne, tak aby pozostawały liniowo niezależne. Udział współrzędnych lokalnych w drganiach normalnych jest określany przez macierz rozkładu energii potencjalnej PED (Potential Energy Distribution). Oryginalnym wkładem Autora jest zdefiniowanie ilościowego kryterium jakości układu współrzędnych lokalnych poprzez parametr EPM. Parametr ten wskazuje, czy drganie normalne można skutecznie wyrazić przez niewielką liczbę współrzędnych wewnętrznych, co zdecydowanie ułatwia zrozumienie charakteru drgań w cząsteczce. O dużej wartości programu VEDA świadczą liczne próby wykorzystania w pracach prowadzonych w innych ośrodkach naukowych po jego udostępnieniu parę lat temu. Zaobserwowałem rosnącą popularność VEDA po liczbie opublikowanych prac, w których program jest wykorzystywany.

Program VEDA został przez Habilitanta połączony z wynikami obliczeń programu Gaussian. Pliki wyjściowe tego programu są wykorzystywane do tworzenia pierwszego przybliżenia układu współrzędnych lokalnych w VEDA. Połączenie informacji o intensywnościach przejść wyliczonych w programie Gaussian z obserwacjami eksperymentalnymi jest kolejnym elementem ułatwiającym interpretację widm w podczerwieni. VEDA umożliwia także symulowanie teoretycznych widm w podczerwieni na podstawie obliczeń w programie Gaussian.

Program VEDA jest rozwijany od kilkunastu lat, a wprowadzane modyfikacje i ulepszenia wynikają ze ścisłej współpracy z zespołami eksperymentatorów i teoretyków. Jest to obecnie

program bardzo dojrzały. Autor sygnalizuje zastosowanie VEDA do cząsteczek 200 atomowych, chociaż te wyniki nie są jeszcze opublikowane.

Pewne wątpliwości może budzić włączenie do rozprawy habilitacyjnej aż 8 prac, w których udział Habilitanta wynosi 20-40%. Większość współautorów pisze zgodnie, że ich praca polegała przede wszystkim na wykonaniu tylko fragmentu publikacji. Żaden z nich nie sugeruje, że idea pracy wyszła od niego. Szczególnie ważne jest oświadczenie prof. dr hab. Jana Czesława Dobrowolskiego, który jest współautorem w 14 na 15 prac przedstawionych do habilitacji, że jego wkład dotyczył przeprowadzenia części obliczeń kwantowo-mechanicznych i współudziału w przygotowaniu manuskryptu publikacji. Z kolei w autoreferacie Habilitant przekonująco przedstawia, jak nowe problemy badawcze rozwiązywane w kolejnych publikacjach pozwoliły krok po kroku udoskonalać program VEDA, który w każdej z przedstawianych prac jest wykorzystany. Jest zatem uzasadnione założenie, że inicjatorem tych prac był dr Michał Jamróz, chociaż wiele z nich wymagało zaangażowania dużego zespołu i stąd niski udział procentowy Habilitanta. W żadnej z 15 prac udział pojedynczego innego współautora nie jest większy od udziału Habilitanta.

W przedstawionych do oceny pracach rozwiązano szereg oryginalnych problemów badawczych. Należą do nich:

- 1) Systematyczna analiza widm w podczerwieni 5-halogenouracyli dzięki wyizolowaniu współrzędnej lokalnej opisującej drganie rozciągające C-Halogen [H6].
- 2) Analiza konformacyjna aminokwasów dzięki wskazaniu w widmach w podczerwieni zakresów widma pozwalających na identyfikację różnych konformerów [H9, H12, H14].
- 3) Dzięki porównaniu widm teoretycznych i eksperymentalnych akrylanu allilu wskazanie dominujących konformerów [H13].
- 4) Wskazanie obszarów widma w podczerwieni izotopologów izopropanolu [H11], kompleksów kwasu mlekowego z wodą [H8], L-cysteiny z wodą [H10] pozwalających na identyfikację najstabilniejszych struktur.
- 5) Stworzenie efektywnych mechanizmów definiowania współrzędnych lokalnych z wykorzystaniem wstępnej informacji z programu Gaussian, redukcji do prostszych współrzędnych lokalnych, normalizacji tych współrzędnych [H1-H15].

Program VEDA będzie z pewnością stosowany do analizy widm w podczerwieni szczególnie w obszarach widma, w których występują liczne przejścia o zbliżonych częstościach. Już po paru latach od jego udostępnienia jest cytowany ponad 200 razy w czasopiśmie z bazy JCR. Program ten jest efektywnym narzędziem pracy, co zostało wykazane w licznych

publikacjach Habilitanta, a także innych autorów z wielu ośrodków zagranicznych. **Uważam, że stworzenie, udoskonalenie i zastosowanie programu VEDA od podstaw jest istotnym osiągnięciem naukowym.**

Ocena dorobku naukowego

Oprócz prac przedstawionych jako podstawa rozprawy habilitacyjnej dr Michał Jamróż opublikował 45 prac ujętych w bazie Journal Citation Reports. Habilitant we wszystkich tych pracach występuje jako jeden ze współautorów. Najczęściej Jego udział polega na interpretacji widm w podczerwieni, która w wielu przypadkach jest kluczowa dla rozwiązania problemu badawczego.

Warto zwrócić uwagę na ostatnie prace, w których pojawia się nowa tematyka badania miar chiralności cząsteczek. Dla przeprowadzenia tych analiz Habilitant napisał nowy program CHIMEA, który jest dostępny na stronie Spectroscopy and Molecular Modeling Group Instytutu Chemii i Techniki Jądrowej.

W latach 1995 – 2010 Habilitant był wykonawcą w 6 grantach krajowych.

Brak jest w życiorysie naukowym Habilitanta staży zagranicznych, a współpraca międzynarodowa ogranicza się do 3 grantów Unii Europejskiej w latach 1994-2002, których kierownikiem w Polsce był doc. dr hab. Marek Borowiak.

Dr Michał Jamróż jest współautorem dwóch uzyskanych patentów oraz autorem ponad 30 ekspertyz dla przemysłu.

Prace Habilitanta są systematycznie prezentowane na konferencjach naukowych – łącznie 50 wystąpień od 1991 roku. Jednak po 2004 roku żadne z wystąpień nie było prezentowane przez Habilitanta – występuje On jako współautor.

Ze względu na charakter jednostek naukowych, w których Habilitant był lub jest zatrudniony, w jego życiorysie nie ma żadnych elementów związanych z pracą dydaktyczną.

Podsumowanie

Habilitacja w dziedzinie chemii jest z jednej strony uznaniem dotychczasowego dorobku naukowego za znaczący w skali międzynarodowej, ale także stwierdzeniem, że kandydat będzie mógł skutecznie występować w nowej roli samodzielnego pracownika naukowego. Oznacza to między innymi zdolność do kreowania nowych tematów badawczych.

Wnioskuje, aby Komisja miała możliwość zapytania Kandydata o dalsze plany naukowe.

Oceniając materiały stanowiące rozprawę habilitacyjną można stwierdzić, że dr Michał Jamróz jest dojrzałym pracownikiem naukowym. Bez Jego twórczego podejścia zespoły badawcze, w których pracował, nie mogłyby rozwiązać wielu istotnych problemów badawczych. Współczesna nauka wymaga pracy zespołowej i twórcy efektywnych, oryginalnych programów komputerowych powinien być oceniany tak jak twórcy oryginalnej aparatury naukowej.

Na podstawie przedstawionych mi do oceny materiałów i biorąc pod uwagę, że dr Michał Jamróz pracuje w instytucie nie prowadzącym działalności dydaktycznej, stwierdzam, że uzyskane przez Niego wyniki naukowe pozwalają wystąpić do Rady Naukowej Instytutu Chemii i Techniki Jądrowej o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego, zgodnie z ustawą z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach i tytule naukowym (Dz.U. Nr 65, poz. 595, z późn. Zmianami). **Wnoszę więc o dopuszczenie dr Michała Jamroza do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.**



Prof. dr hab. Marek Kręglewski