

Prof. dr hab. Szczepan Roszak
Zakład Modelowania Molekularnego i Chemii Kwantowej
Instytut Chemii Fizycznej i Teoretycznej
Wydział Chemiczny Politechniki Wrocławskiej
e-mail: szczepan.roszak@pwr.edu.pl

Wrocław, 6. 11. 2014 r.

**Ocena dorobku naukowego i recenzja rozprawy habilitacyjnej dr Michała
H. Jamróza zatytułowanej „Analiza PED teoretycznych widm
oscylacyjnych za pomocą programu VEDA”**

Uwagi wstępne

Dr Michał Jamróż większość swojego życia naukowego spędził w Instytucie Chemii Przemysłowej (I. Ch. P.) w Warszawie, przy czym najdłużej pracował w Zespole Spektroskopii i Modelowania Molekularnego. Wydaje się, że duży wpływ na sylwetkę naukową Kandydata ma fakt ukończenia Uniwersytetu Jagiellońskiego jako magister fizyki teoretycznej. Jego praca doktorska została wykonana w I. Ch. P. i dotyczyła zagadnień związanych z interpretacją widm w podczerwieni w oparciu o techniki sztucznej inteligencji. Badania te miały charakter teoretyczny i praca wymagająca umiejętności numerycznych została obroniona ze stopniem Doktora Nauk Technicznych. Przyłączenie się do Zespołu Spektroskopii i Modelowania Molekularnego rozpoczęło długi okres działalności mieszczącej się pod hasłem „Interpretacja widm IR”. Większość publikacji Kandydata dotyczy widm w podczerwieni. Prace na inne tematy stanowią znikomą część. Prawie trzydziestoletni okres po doktoracie przyniósł 56 publikacji i mniej więcej tyle samo prezentacji konferencyjnych. Prosta statystyka wskazuje na dwie publikacje rocznie i wydaje się świadczyć o latach spokojnej i stabilnej pracy. W zbiorze prac wybranych jako osiągnięcie habilitacyjne tylko 6 publikacji posiada udział Habilitanta powyżej 50%. Pozostałe, a także prace nie włączone do zbioru mają maksymalny udział 50%

przy czym w większości z nich ten udział jest bardzo mały. Przedstawiona dokumentacja nie pomaga w wyjaśnieniu tego fenomenu, możliwe, że oszacowanie swojego wkładu przez Habilitanta jest zbyt pesymistyczne. Przez ten okres czasu dr Jamrózowi nie udało się odbyć stażu zagranicznego lub choćby stażu poza miejscem zatrudnienia, za to wśród jego współpracowników jest szereg osób spoza I. Ch. P.

Recenzja rozprawy habilitacyjnej.

Jako osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę przewodu habilitacyjnego p.t. „Analiza PED teoretycznych widm oscylacyjnych za pomocą programu VEDA” dr Jamróz przedstawił jednotematyczny cykl 15 publikacji. Jako omówienie celu naukowego, do materiałów został dołączony rozdział przybliżający czytelnikowi bazę i idee dla skonstruowania programu VEDA. Tytuł osiągnięcia jest sformułowany dość nieszczęśliwie podając w tytule nazwę programu komputerowego, natomiast dobrze charakteryzuje osiągnięcia za które Habilitant spodziewa się uzyskać stopień naukowy. Podstawą rozprawy są publikacje wybrane z 30 prac opublikowanych po 2001 roku. Pominięte prace z tego okresu posiadają podobny charakter. Zbiór ten można podzielić na dwie części. Pierwsza, to prace z dominującym udziałem Habilitanta prezentujące program VEDA i jego udoskonalenia (H1-H5, H7), opublikowane w *J. Mol. Struct.* (3 prace), *Spectrochim. Acta* (2 prace) i jedna praca w *Vib. Spectr.* Druga grupa to zbiór publikacji ze znacznie mniejszym udziałem Habilitanta w których zakres materiału jest znacznie szerszy (*J. Phys. Chem.* (x2), *PCCP* (x2), *ChemPhysChem* (x2), *CrystEngComm.* (x1) i *Vib. Spectr.* (x2). „*Impact faktory*”, jeśli przyjąć je za miarę poziomu naukowego, wskazują, że interpretacja PED pełni charakter uzupełniający w stosunku do pozostałej części materiału badawczego. Nie można ignorować znaczenia PED i profesjonalna praca raportująca widma IR musi je zawierać, ale dzisiaj jest to standardowa procedura. Wydaje się, że Habilitant wyspecjalizował się w tym bardzo wąskim kawałku spektroskopii IR i jest bardzo pożądanym współpracownikiem, ale

niestety z małym wkładem do nowości i oryginalności badań. Procedura PED została wprowadzona do nauki w latach pięćdziesiątych ubiegłego wieku jako narzędzie wspomagające przypisania modów normalnych w widmach wibracyjnych. Jak stwierdza Habilitant, dla małych cząsteczek przypisania takie są proste i naturalne. Oczywiście sytuacja się komplikuje wraz ze wzrostem rozmiaru układów. Udział poszczególnych drgań w modach normalnych szybko się komplikuje i zachodzi pytanie czy taka interpretacja ma nadal sens. Niemierzalność PED'ów powoduje, że brakuje jednoznacznego rozwiązania i różne podejścia są uprawnione. Literatura przedmiotu dokumentuje szereg możliwych wariantów. Poszukiwanie nowych jest oczywiście uprawnione. Przypisania pasm dla dużych układów molekularnych, szczególnie zdelokalizowanych drgań szkieletowych, jest oczywiście problematyczne, obciążone punktem widzenia interpretatora, ale nadal posiadają one wartość interpretacyjną. Próba znalezienia własnej drogi interpretacji widm jest największym osiągnięciem Habilitanta i tak też jest to zaprezentowane w materiałach. Problem ten stanowi ważne, ale bardzo wąskie zagadnienie w spektroskopii IR. Duża część przedstawionych wyników stanowi już rutynowe zastosowanie dobrze opanowanej techniki. Wykonywanie kolejnych interpretacji ma charakter tworzenia bazy danych i trudno się w nich doszukać elementów nowości.

Ocena działalności dydaktycznej

Informacje na temat działalności dydaktycznej nie są zaprezentowane, zapewne Habilitant nie uznał ich za znaczące. Wykorzystanie Jego programów w laboratoriach studenckich niewątpliwie do osiągnięć dydaktycznych należy.

Uwagi ogólne

Przedstawiony do oceny materiał stanowi raport z wieloletniej działalności badawczej. Zakres tej działalności, dotyczącej interpretacji widm w podczerwieni w oparciu o wyznaczone wartości PED, jest bardzo wąski. Zapropionowana w latach 50-siątych metoda jest dzisiaj częścią standardowego

opracowywania widm. Jako wielkość niemierzalna, PED'y mają szeroki zakres interpretacyjny. Wypracowanie własnej metodologii w postaci algorytmu zaimplementowanego w programie VEDA to główne osiągnięcie recenzowanego Badacza.

Oceniana działalność ma charakter ekstensywny. Wielkości metryczne (*impact factory*, index Hirscha) charakteryzujące osiągnięcia Kandydata są rozsądne i satysfakcjonujące. Dr Jamróz jest również rozsądnie często cytowany. Przedstawiony udział w pracach (rzetelnie opracowany przez Habilitanta a także oceniony na podstawie oświadczeń współautorów) świadczy że charakter udziału jest często tylko wspomagający. Bardzo wąski zakres wyspecjalizowania Habilitanta jest niewątpliwym ograniczeniem wpływającym na Jego naukową samodzielność. Interesujące byłoby wiedzieć jak Habilitant zamierza skosztować swoją samodzielność naukową – niestety materiały takich informacji nie zawierają.

Dr Jamróz uczestniczył, jako wykonawca, w grantach zagranicznych i polskich. Jego zaangażowanie w nich jest trudne do oceny ale zapewne nie jest niższe niż Jego udział w publikacjach naukowych. Długoletnia kariera przyniosła też inne, niezbyt bogate, ale wartościowe osiągnięcia. Habilitant jest współautorem dwóch patentów, autorem dwóch ekspertyz i 18 recenzji dla międzynarodowych pism naukowych. Materiał habilitacyjny, zgodnie z wymaganiami Art. 16.1 Ustawy, dowodzi, że jego Autor „wykazuje się istotną aktywnością naukową” i „wkład Autora w rozwój dyscypliny naukowej”, z przedstawionymi wątpliwościami, można określić jako „znaczący”.

Ocena końcowa

Uważam, że przedstawiony materiał spełnia, chociaż w sposób minimalny, warunki stawiane rozprawom habilitacyjnym określone w ustawie z dnia 14 marca 2003 roku „O stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki” (Dz. U. z 2003 r. nr 65 poz. 595 ze zm. w Dz. U. z 2005 r, nr 164, poz. 1365, Rozporządzenie MniSW Dz. U. Z 2011, nr 196. Poz.

1165 oraz Rozporządzenie MNiSW Dz. U. z 2014 r. poz. 1383) a dorobek naukowy kandydata uzasadnia nadanie mu stopnia doktora habilitowanego. Wobec tego stawiam wniosek o dopuszczenie dr Michała H. Jamróza do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Szczepan Roszak

Szczepan Roszak