



Dr hab. inż. Dariusz Pogocki, prof. IChTJ.
Centrum Badań i Technologii Radiacyjnych
Instytut Chemii i Techniki Jądrowej
ul. Dorodna 16, 03-195 Warszawa
E-mail: d.pogocki@ichtj.waw.pl

Warszawa, 16.10.2014

Recenzja Dorobku Naukowego

przedstawionego w postępowaniu habilitacyjnym w dziedzinie **nauk chemicznych** w dyscyplinie **chemia** przez doktora **Michała H. Jamroza**, adiunkta w Instytucie Chemii i Techniki Jądrowej w Warszawie

Niniejszą opinię sporządziłem na wniosek Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów, która działa na podstawie art. 18a ust. 5 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytułach naukowych oraz o stopniach i tytułach w zakresie sztuki (Dz.U. z 2003 r., nr 65, poz. 595; Dz.U. z 2005 r., nr 164, poz. 1365; Dz.U. z 2011 r., nr 84, poz. 455) powołaną dnia 4 września 2014 r. komisją habilitacyjną z moją osobą w roli recenzenta.

Doktor Michał Jamróz uzyskał tytuł zawodowy magistra fizyki o specjalności fizyka teoretyczna na Wydziale Matematyczno-Fizyczno-Chemicznym Uniwersytetu Jagiellońskiego w 1977 roku.

Swoją pracę zawodową habilitant związał z Instytutem Chemii Przemysłowej imienia profesora Ignacego Mościckiego w Warszawie zajmując się tam pracami badawczymi i wdrożeniami w zakresie spektroskopii molekularnej, chemii fizycznej i teoretycznej, której rezultatem jest 60 opublikowanych prac badawczych w periodykach naukowych o sumarycznym współczynniku wpływu (IF) 122. Prace te uzyskały uznanie środowiska naukowego, były wielokrotnie cytowane. W chwili składania dokumentacji prace były cytowane ponad 480 razy a Indeks Hirscha habilitanta wynosił 13.

Wśród osiągnięć zawodowych habilitanta należy wymienić także te o charakterze aplikacyjnym. Jest on współautorem metod analitycznych stosowanych w spektroskopii oraz wielu programów komputerowych mających

zastosowanie w spektroskopii, badaniach strukturalnych i przewidywaniu właściwości katalizatorów.

Habilitant jest także współautorem dwóch patentów, oraz był czynnym autorem ponad trzydziestu, wykonanych w latach 1995-2004 poufnych ekspertyz dla przedsiębiorstw Polkolor oraz Polskiej Wytwórni Papierów Wartościowych.

Doktor Jamróz w latach 1994-2010 był wykonawcą trzech projektów naukowych (grantów) międzynarodowych a także siedmiu projektów finansowanych ze środków krajowych.

Za swoją działalność zawodową habilitant otrzymał w 2013 zespół nagród Instytutu Chemii Przemysłowej (konkurs wrocławski). Jego indywidualne osiągnięcia naukowe zostały w 2011 roku nagrodzone przez Prezydenta Rzeczypospolitej Polskiej „Złotym Medalem za Całokształt Działalności”. Kompetencje zawodowe habilitanta zostały także dostrzeżone przez redaktorów czasopism naukowych krajowych i międzynarodowych (*Spectrochimica Acta*, *Journal of Molecular Structure*, *Vibrational Spectroscopy* oraz *Zeitschrift für Physikalische Chemie*), którzy powierzyli mu recenzje osiemnastu artykułów naukowych.

Przedłożył do recenzji dorobek naukowy habilitanta w szczególności powstał w Instytucie Chemii Przemysłowej, w którym w 1986 roku uzyskał doktorat nauk technicznych na podstawie rozprawy pod tytułem „Algorytm rozpoznawania podstruktur w związkach organicznych metodą „sztucznej inteligencji”, na podstawie widm w podczerwieni”, której promotorem był profesor Zbigniew Hippe.

Pan doktor Michał Jamróz przedłożył jako osiągnięcia naukowe bibliografię postaw postępowania habilitacyjnego cykl 15 prac opublikowanych w czasopiśmie z bazy Journal Citation Report o sumarycznym współczynniku wpływu równym 37. Prace te zostały wybrane z imponującego dorobku naukowego habilitanta uzyskanego po doktoracie a liczącego 56 prac naukowych o IF równym 117.

Przedstawione prace powstały w wielokierunkowej współpracy krajowej z pracownikami naukowymi Instytutu Chemii Przemysłowej, Uniwersytetów Jagiellońskiego i Warszawskiego, Instytutów Chemii Fizycznej i Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk, Narodowego Instytutu Leków oraz Instytutu Chemii i Techniki Jądrowej. Szacowane wielkość udziału habilitanta w

przedstawionych pracach zgodnie z wymogami ustawowymi dokumentują zał. cz. o wiadczenia habilitanta oraz współautorów publikacji. W rezultacie zakumulowana wielkość udziału habilitanta w przedstawionych pracach wynosi ponad siedemset procent.

Zgodnie z o wiadczeniem habilitanta jego wkładem do przedstawionych publikacji była interpretacja oscylacyjnych widm teoretycznych i eksperymentalnych badanych molekuł, dyskusja wyników oraz współudział w przygotowaniu manuskryptów.

Najważniejsze w dorobku habilitanta wydaje się to, iż opracował on i wdrożył nowatorskie metody analizy „teoretycznych” widm oscylacyjnych (IR i Ramana), uzyskanych na drodze obliczeń metodami chemii kwantowej.

Zastosowana z powodzeniem metoda pozwala na zrozumienie postaci obliczeniowej drgań normalnych a w konsekwencji przypisania drgań odpowiednim grupom funkcyjnym i fragmentom badanej cz. stezki. W celu interpretacji drgań normalnych wprowadza się procedurę wyrażania współrzędnych normalnych, jako sumy współrzędnych lokalnych odpowiadających grupom funkcyjnym i fragmentom szkieletu cz. stezki. Tak wyrażone współrzędne lokalne mają postać dobrze zrozumiałą dla chemików interpretujących widma oscylacyjne - zmian długości wiąz, kątów między wiązaniami i kątów dwuściennych wiąz. Procedura ta, nazywana rozkładem energii potencjalnej PED (*Potential Energy Distribution*), pozwala na wyrażenie energii drgania normalnego (względem nieruchomego środka masy cz. stezki) jako sumy energii drgań fragmentów cz. stezki. Oryginalnym wkładem habilitanta jest stworzenie algorytmu pozwalającego na automatyczną (z możliwością korekcji przez użytkownika) konstrukcję niezależnych liniowo układów współrzędnych lokalnych oraz znalezienie (zbudowanie) współrzędnych złożonych najlepiej oddających drgania normalne. Optymalizacja procedury PED autorstwa habilitanta pozwala na jej zastosowanie do układów wieloatomowych (powyżej 20 atomów), dla których „ręczna” konstrukcja układu współrzędnych lokalnych dobrze opisujących drgania poszczególnych fragmentów cz. stezki jest praktycznie niemożliwa.

Dzięki wkładowi pracy habilitanta, uwzględniająca macierz stałych siłowych procedura PED stała się oparta na solidnych podstawach fizycznych alternatyw

do powszechnie stosowanej interpretacji opartej na wizualizacji wychyle atomów w danym drganiu.

Opracowany przez doktora Jamroza algorytm został zastosowany w programie obliczeniowym jego autorstwa, służącym interpretacji teoretycznych widm oscylacyjnych. Program ten o nazwie VEDA jest przez autora stale udoskonalany a jego najnowsze wersje pozwalają interpretować widma układów molekularnych o wielkości do 480 atomów. Stronę dostępną, wraz z uproszczonym przewodnikiem użytkownika, na stronie internetowej zespołu badawczego, w którym autor jest zatrudniony (<http://smmg.pl/software/software-spesca.html>). Wyjaśnieniu zasad działania programu VEDA oraz ich ilustracji na modelowych przykładach została poświęcona praca, której habilitant jest wyłącznym autorem, opublikowana w bardzo cenionym czasopiśmie *Spectrochimica Acta A.* (praca H1) a także w przedstawionym przez habilitanta autoreferacie.

W przedstawionych jako osiągnięcia naukowe pracach, opublikowanych w latach 2001-2013, można zaobserwować stopniową ewolucję algorytmu programu VEDA oraz zastosowanych w nim rozwiązań (autor szczegółowo opisuje to w swoim autoreferacie). Dzięki pracy habilitanta, autorom publikacji udało się zinterpretować wiele bardzo interesujących obserwacji o charakterze podstawowym. Z mojego punktu widzenia szczególnie interesujące wydają się te prace, w których w oparciu o wyniki obliczeń kwantowo-mechanicznych (DFT/*ab initio*), stosując autorskie rozwiązania habilitanta, zinterpretowano uzyskane w niskotemperaturowej izolacji matrycowej, do wiadczalne widma IR konformerów aminokwasów L-cysteiny i L-izoseryny.

Co warto podkreślić program VEDA został jak dotychczas doceniony ponad dwustoma cytowaniami. Autorzy publikacji cytujących program wykorzystywali go między innymi w pracach dotyczących: - nieliniowych zjawisk optycznych w badanych związkach i materiałach; - wiąz wodorowych i oddziaływa elektronowych donor-akceptor; - badań konformacyjnych białek i stepek; - badań stepek leków i herbicydów, kompleksów metali i metalo-organicznych, oraz i wielu innych. Również były to techniki eksperymentalne, których wyniki interpretowano wykorzystując autorskie rozwiązania habilitanta: - spektroskopia ramanowska próbek zaabsorbowanych (SERS); - czasowo rozdzielcza

spektroskopia ramanowska; - ramanowska aktywność optyczna (RROA) i ramanowska rezonansowa spektroskopia wzbudzana ultrafioletem (UV-RR).

Osobiście uważam, że dr Michał Jamróz jest wysokiej klasy specjalistą, którego praca naukowa zyskała uznanie w środowisku naukowym w Kraju, a także poza jego granicami. Odnosząc się do wymogów ustawowych, nie mam najmniejszych wątpliwości, że przedstawiony mi do oceny dorobek habilitanta stanowi **znaczny wkład** Autora w rozwój badań nad interpretacją danych spektroskopowych a w szczególności pochodzących ze spektroskopii wibracyjnej IR i Ramana, oraz że Habilitant wykazuje na tym polu **istotną aktywność naukową**. Uważam, iż przedstawiony przez Kandydata materiał spełnia całkowicie wymagania ustawowe (Dz.U. z 2003 r., nr 65, poz. 595; Dz.U. z 2005 r., nr 164, poz. 1365; Dz.U. z 2011 r., nr 84, poz. 455) i uzasadnia nadanie doktorowi Michałowi Jamrozowi stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie **nauk chemicznych** w dyscyplinie **chemia**. Dlatego wnoszę o dopuszczenie dr Michała Jamroza do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Dariusz Fogochi