

Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny

I. INFORMACJA O OSIĄGNIĘCIACH NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY

Stosowane skróty:

L^{MEiN} – liczba punktów na podstawie: Załącznika do komunikatu Ministra Edukacji i Nauki z dnia 9 lutego 2021 r.

L^{Web of Science} – liczba cytowań według bazy Web of Science. Stan na dzień 07.04.2021

L^{Scopus} – liczba cytowań według bazy Scopus. Stan na dzień 07.04.2021

IF²⁰¹⁹ -IF z roku 2019

H1. **Mateusz Z. Brela***, Marek J. Wójcik, Łukasz J. Witek, Marek Boczar, Ewa Wrona, Rauzah Hashim and Yukihiko Ozaki *Born–Oppenheimer Molecular Dynamics Study on Proton Dynamics of Strong Hydrogen Bonds in Aspirin Crystals, with Emphasis on Differences between Two Crystal Forms* **J. Phys. Chem. B**, 2016, 120, 3854–3862.

IF²⁰¹⁹ = 2,857

L^{Web of Science} = 18

L^{Scopus} = 18

L^{MEiN}=140

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, wykonaniu wszystkich obliczeń kwantowo chemicznych, współudziale w interpretacji wyników badań, napisaniu wstępnej wersji manuskryptu i korespondencji z edytorem czasopisma. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 51%.

H2. Maciej Gług, **Mateusz Z. Brela***, Marek Boczar, Andrzej M. Turek, Łukasz Boda, Marek J. Wójcik, Takahito Nakajima, Yukihiko Ozaki, *Infrared Spectroscopy and Born–Oppenheimer Molecular Dynamics Simulation Study on Deuterium Substitution in the Crystalline Benzoic Acid*, **J. Phys. Chem. B**, 2017, 121, 479–489.

IF²⁰¹⁹ = 2,857

L^{Web of Science} = 5

L^{Scopus} = 6

L^{MEiN}=140

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, współudziale w interpretacji wyników badań, poprawie wstępnej wersji manuskryptu i korespondencji z edytorem czasopisma. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 33%.

H3. **Mateusz Z. Brela***, Marek Boczar, Marek J Wójcik, Harumi Sato, Takahito Nakajima, Yukihiko Ozaki, *The Born - Oppenheimer Molecular Simulations of Infrared Spectra of Crystalline Poly-(R)-3-hydroxybutyrate with Analysis of Weak C-H...O=C Hydrogen Bonds*, **Chemical Physics Letters**, 2017, 678, 112-118.

IF²⁰¹⁹ = 2,029

L^{Web of Science} = 6

L^{Scopus} = 7

L^{MEiN}=70

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, wykonaniu wszystkich obliczeń kwantowo chemicznych, współudziale w interpretacji wyników badań, napisaniu wstępnej wersji manuskryptu i korespondencji z edytorem czasopisma. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 60%.

- H4. **Mateusz Z. Brela**, Marek Boczar, Leszek M. Malec, Marek J Wójcik*, Takahito Nakajima, Spectroscopic study of uracil, 1-methyluracil and 1-methyl-4-thiouracil: Hydrogen bond interactions in crystals and ab-initio molecular dynamics, *Spectrochimica Acta Part A - Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2018,197, 194-201.

IF²⁰¹⁹ = 3,232L^{Web of Science} = 1L^{Scopus} = 2L^{MEiN}=100

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, wykonaniu wszystkich obliczeń kwantowo chemicznych, współudziale w interpretacji wyników badań, napisaniu wstępnej wersji manuskryptu. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 60%.

- H5. **Mateusz Z. Brela***, Marek J. Wójcik, Marek Boczar Erika Onishi Harumi Sato Takahito Nakajima Yukihiro Ozaki, *Study of hydrogen bond dynamics in Nylon 6 crystals using IR spectroscopy and molecular dynamics focusing on the differences between α and γ crystal forms. International Journal of Quantum Chemistry*, 2018, 118 Article number e2559.

IF²⁰¹⁹ = 1,747L^{Web of Science} = 7L^{Scopus} = 8L^{MEiN}=70

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, wykonaniu wszystkich obliczeń kwantowo chemicznych, współudziale w interpretacji wyników badań, napisaniu wstępnej wersji manuskryptu i korespondencji z edytorem czasopisma. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 51%.

- H6. **Mateusz Z. Brela***, Marek J. Wójcik, Marek Boczar, Łukasz, J. Witek, Takehiro Yonehara, Takahito Nakajima, Yukihiro Ozaki *Proton dynamics in crystalline tropolone studied by Born-Oppenheimer molecular simulations, Chemical Physics Letters*, 2018, 707, 54-60.

IF²⁰¹⁹ = 2,029L^{Web of Science} = 4L^{Scopus} = 5L^{MEiN}=70

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, wykonaniu wszystkich obliczeń kwantowo chemicznych, współudziale w interpretacji wyników badań, napisaniu wstępnej wersji manuskryptu i korespondencji z edytorem czasopisma. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 51%.

- H7. **Mateusz Z. Brela***, Oskar Klimas, Ewa Surmiak, Marek Boczar, Takahito Nakajima, Marek J. Wójcik *Comparison of the Hydrogen Bond Interaction Dynamics in the Guanine and Cytosine Crystals: Ab Initio Molecular Dynamics and Spectroscopic Study, J. Phys. Chem. A*, 2019, 123, 10757-10763.

IF²⁰¹⁹ = 2,600L^{Web of Science} = 3L^{Scopus} = 5L^{MEiN}=100

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, wykonaniu wszystkich obliczeń kwantowo chemicznych, współudziale w interpretacji wyników badań, napisaniu

wstępnej wersji manuskryptu i korespondencji z edytorem czasopisma. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 55%.

- H8. **Mateusz Z. Brela**, Alja Prah, Marek Boczar, Jernej Stare, Janez Mavri *Path Integral Calculation of the Hydrogen/Deuterium Kinetic Isotope Effect in Monoamine Oxidase A-Catalyzed Decomposition of Benzylamine* **Molecules** 2019, 24(23), 4359.

IF²⁰¹⁹ = 3,267

L^{Web of Science} = 3

L^{Scopus} = 2

L^{MEiN}=100

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, wykonaniu części obliczeń kwantowo chemicznych, współudziale w interpretacji wyników badań, napisaniu wstępnej wersji manuskryptu. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 60%.

- H9. **Mateusz Z. Brela***, Oskar Klimas, Marek Boczar, Takahito Nakajima, Marek J. Wójcik *A comparison of the hydrogen bond interaction dynamics in the adenine and thymine crystals: BOMD and spectroscopic study*, **Spectrochimica Acta Part A - Molecular and Biomolecular Spectroscopy**, 2020, 237, 118398.

IF²⁰¹⁹ = 3,232

L^{Web of Science} = 1

L^{Scopus} = 1

L^{MEiN}=100

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaplanowaniu badań, wykonaniu części obliczeń kwantowo chemicznych, współudziale w interpretacji wyników badań, napisaniu wstępnej wersji manuskryptu i korespondencji z edytorem czasopisma. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 60%.

- H10. **Mateusz Z. Brela**, Marek Boczar, Łukasz Boda and Marek J. Wójcik, *Molecular Dynamics Simulations of Vibrational Spectra of Hydrogen-Bonded Systems* rozdział w *Frontiers of Quantum Chemistry*, Springer Japan 2018. strony: 353-376, edytorzy: Marek J. Wójcik, Hiroshi, Bernard Kirtman, Yukihiro Ozaki Springer Nature, Singapur 2018.

Mój wkład w powstanie tej pracy polegał na zaproponowaniu tematyki, napisaniu wstępnej wersji manuskryptu i dokonaniu przeglądu literaturowego. Swój wkład w powstanie publikacji szacuję na: 60%.

II. INFORMACJA O AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ

Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych niewymienionych w pkt I.

- P1. Grzegorz Mazur*, Marcin Makowski*, **Mateusz Brela** *Effective Resource Allocation in Parallel Quantum-Chemical Calculations*, **Computing and Informatics**, 2011, 30, 2011, 761-771. IF²⁰¹⁹ = 0.496. L^{MEiN} = 20.
- P2. **Mateusz Brela**, Jernej Stare, Gordana Pirc, Marija Sollner-Dolenc, Marek Boczar, Marek J. Wójcik, and Janez Mavri*, *Car–Parrinello Simulation of the Vibrational Spectrum of a Medium Strong Hydrogen Bond by Two-Dimensional Quantization of the Nuclear Motion: Application to 2-Hydroxy-5-nitrobenzamide*, **J. Phys. Chem. B**, 2012, 116, 4510–4518. IF²⁰¹⁹ = 2,857. L^{MEiN} = 140.
- P3. **Mateusz Z. Brela***, Marek Janusz Wójcik*, Marek Boczar, R. Hashim, *Car–Parrinello simulation of the vibrational spectra of strong hydrogen bonds with isotopic substitution effects: Application to oxalic acid dihydrate*, **Chemical Physics Letters** 2013, 558, 88. IF²⁰¹⁹ = 2,029. L^{MEiN} = 70.
- P4. Maria G. Babashkina, Damir A. Safin, Koen Robeyns, Mariusz P. Mitoraj, Piotr Kubisiak, **Mateusz Brela**, Yann Garcia*; *Experimental and theoretical investigations of the Ni(II) complex with N-phosphorylated thiourea iPrNHC(S)NHP(O)(OPh)₂*, **CrystEngComm**, 2013, 15, 7845-7851. IF²⁰¹⁹ = 3,117. L^{MEiN} = 100.
- P5. **Mateusz Brela**, Artur Michalak, Philip P. Power, Tom Ziegler*, *Analysis of the Bonding between Two M(μ-NAr[#]) Monomers in the Dimeric Metal(II) Imido Complexes {M(μ-NAr[#])₂ [M = Si, Ge, Sn, Pb; Ar[#] = C₆H₃-2,6-(C₆H₂-2,4,6-R₃)₂]. The Stabilizing Role Played by R = Me and iPr*, **Inorganic Chemistry** 2014, 53, 2325–2332. IF²⁰¹⁹ = 4,825. L^{MEiN} = 140.
- P6. Dirk Henkensmeier*, Hyeongrae Cho, **Mateusz Brela**, Artur Michalak*, Alexander Dyck, Wiebke Germer, Ngoc My Hanh Duong, Jong Hyun Jang, Hyoung-Juhn Kim, Nam-Suk Woo, Tae-Hoon Lim, *Anion conducting polymers based on ether linked polybenzimidazole (PBI-OO)*, **International Journal of Hydrogen Energy**, 2014, 39, 2842–2853. IF²⁰¹⁹ = 4,939. L^{MEiN} = 140.
- P7. Wiebke Germer, Janine Leppin, Carolina Nunes Kirchner, Hyeongrae Cho, Hyoung-Juhn Kim, Dirk Henkensmeier, Kwan-Young Lee, **Mateusz Brela**, Artur Michalak and Alexander Dyck*, *Phase Separated Methylated Polybenzimidazole (O-PBI) Based Anion Exchange Membranes*, **Macromolecular Materials and Engineering**, 2015, 300, 497-509. IF²⁰¹⁹ = 3,853. L^{MEiN} = 70.
- P8. Dirk Henkensmeier*, Ngoc My Hanh Duong, **Mateusz Brela**, Karol Dyduch, Artur Michalak, Katja Jankova, Hyeongrae Cho, Jong Hyun Jang, Hyoung Juhn Kim, Lars N. Cleemann, Qingfeng Li, Jens Oluf Jensen; *Tetrazole substituted polymers for High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells*; **Journal of Materials Chemistry A**, 2015, 3, 14389-14400. IF²⁰¹⁹ = 11,301. L^{MEiN} = 140.
- P9. **Mateusz Z. Brela***, Marek J. Wójcik*, Marek Boczar, Łukasz Witek, Mitsuru Yasuda, and Yukihiro Ozaki; *Car–Parrinello Molecular Dynamics Simulations of Infrared Spectra of Crystalline Vitamin C with Analysis of Double Minimum Proton Potentials for Medium-Strong Hydrogen Bonds*; **J. Phys. Chem. B**, 2015, 119, 7922-7930. IF²⁰¹⁹ = 2,857. L^{MEiN} = 140.

- P10. Andrzej M. Turek, Tallapragada S. R. Krishna, **Mateusz Brela**, Jack Saltiel, *Fluorescence Excitation Spectra of All-trans-1,6-Diphenylhexatriene Conformers: Adiabatic Conformer Equilibration in the 21Ag State*, **Chemical Physics Letters** 2016, 648, 19-24, IF²⁰¹⁹ = 2,029. L^{MEiN} = 70.
- P11. Damir A. Safin, Koen Robeyns, Maria G. Babashkina, Yaroslav Filinchuk, Aurelian Rotaru, Catalin Jureschi, Mariusz P. Mitoraj, James Hooper, **Mateusz Brela**, Yann Garcia, *Polymorphism driven optical properties of an anil dye*, **CrystEngComm**, 2016, 18, 7249-7259. IF²⁰¹⁹ = 3,117. L^{MEiN} = 100.
- P12. Andrzej Eilmes, Piotr Kubisiak, **Mateusz Z. Brela**, *Explicit Solvent Modeling of IR and UV-vis Spectra of 1-Ethyl-3-methylimidazolium Bis(trifluoromethylsulfonyl)imide Ionic Liquid* **J. Phys. Chem. B**, 2016, 120, 11026-11034. IF²⁰¹⁹ = 2,857. L^{MEiN} = 140.
- P13. Hyeonrae Cho, Dirk Henkensmeier, **Mateusz Brela**, Artur Michalak, Jong Hyun Jang, Hyoung-Juhn Kim, Kwan-Young Lee, Jonghee Han, Suk Woo Nam *Anion conducting methylated aliphatic PBI and its calculated propertie*, **Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics**, 2017, 5, 256-265. IF²⁰¹⁹ = 2,489. L^{MEiN} = 100.
- P14. Piotr Goszczycki, Katarzyna Stadnicka, **Mateusz Z Brela**, Jarosław Grolik, Katarzyna Ostrowska, *Aggregation Induced Emission Enhancement (AIEE) of the π - π interacting pyrrolo[2,3-b]quinoxaline derivatives containing 2-thienyl substituent*. **Journal of Molecular Structure**, 2017, 1146, 337-346. IF²⁰¹⁹ = 2,463. L^{MEiN} = 70.
- P15. Silvia Díaz, **Mateusz Z. Brela**, Soledad Gutiérrez-Oliva, Alejandro Toro-Labbé, Artur Michalak, *ETS-NOCV Decomposition of the Reaction Force. The HCN/CNH Isomerization Reaction assisted by Water*. **Journal of Computational Chemistry**, 2017, 38, 2076-2087. IF²⁰¹⁹ = 2,976. L^{MEiN} = 100
- P16. Filip Šebesta, **Mateusz Brela**, Silvia Diaz, Sebastian Miranda, Jane S. Murray, Soledad Gutiérrez-Oliva, Alejandro Toro-Labbé, Artur Michalak, Jaroslav V. Burda *The Influence Of The Metal Cations and Microhydration On The Reaction Trajectory Of The N3 \leftrightarrow O2 Thymine Proton Transfer. Quantum Mechanical Study*, **Journal of Computational Chemistry**, 2017, 38, 2680-2692. IF²⁰¹⁹ = 2,976. L^{MEiN} = 100.
- P17. Piotr Talaga, **Mateusz Z. Brela**, Artur Michalak, *ETS-NOCV decomposition of the reaction force for double-proton transfer in formamide-derived systems*, **Journal of Molecular Modeling**, 2018, 24, 27. IF²⁰¹⁹ = 1,346. L^{MEiN} = 40.
- P18. **Mateusz Z. Brela**, Piotr Kubisiak, Andrzej Eilmes, *Understanding the Structure of the Hydrogen Bond Network and Its Influence on Vibrational Spectra in a Prototypical Aprotic Ionic Liquid*, **J. Phys. Chem. B**, 2018, 122, 9527-9537. IF²⁰¹⁹ = 2,857. L^{MEiN} = 140
- P19. Damian Muszak, Beata Łabuzek, **Mateusz Z. Brela**, Aleksandra Twarda-Clapa, Mirosława Czub, Bogdan Musielak, Ewa Surmiak, Tad A. Holak, *The synthesis and characterization of tetramic acid derivatives as Mdm2-p53 inhibitors* **Journal of Molecular Structure**, 2019, 1189, 161-174. IF²⁰¹⁹ = 2,463. L^{MEiN} = 70.
- P20. Łukasz Boda, Marek Boczar, **Mateusz Z. Brela**, Marek J. Wójcik, Takahito Nakajima, *Quantum-mechanical study of energies, structures and vibrational spectra of the HF complexed with dimethyl ether*, **Chemical Physics Letters**, 2019, 731, 136590. IF²⁰¹⁹ = 2,029. L^{MEiN} = 70.

P21. Leszek, M. Malec Mateusz Z. Brela, Katarzyna M. Stadnicka, *Displacive or Order-Disorder Phase Transition? The H-bond Dynamics in Multicaloric Ammonium Sulfate* **Acta Materialia**, 2021, 116782. IF²⁰¹⁹ = 7,656. L^{MEiN} = 200.

2. Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych.

Mateusz Z. Brela, Marek Boczar, Łukasz Boda and Marek J. Wójcik, *Dynamic and Static Quantum Mechanical Studies of Vibrational Spectra of Hydrogen-Bonded Crystals*. Chapter in *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach*, strony: 327-352, edytorzy: Yukihiro Ozaki Marek Janusz Wójcik, Jürgen Popp, Wiley-VCH, Weinheim, 2019.

3. Informacja o wystąpieniach na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych:

• **Wykłady na zaproszenie:**

1. 2nd International Symposium on Quantum Chemistry, Nishinomiya, Japan, 8.11.2017 *Hydrogen bond interactions in polymers from molecular dynamics point of view*, Mateusz Brela
2. Dzień otwarty ACK Cyfronet, Kraków, 25.11.2019 *Predykcja struktur chemicznych metodami AI*, Mateusz Brela

• **Nagrodzone prezentacje posterów:**

1. Modeling and Design of Molecular Materials 2012, Wrocław, Poland, 10-14.09.2012, awards for the best poster presentation, *Molecular modeling of the alkaline anionic exchange membranes for fuel cells*, **Mateusz Brela**, Artur Michalak.
2. Modeling and Design of Molecular Materials 2014, Kudowa Zdrój, Poland, 29.06-3.07.2014, awards for the best poster presentation, *Theoretical analysis of ion-polymer interactions in PBI-based membranes with ETS-NOCV method*, **Mateusz Brela**. Artur Michalak.
3. „59 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego” Poznań, 19-23.09.2016 awards for the best poster presentation: *Analiza wiązań wodorowych za pomocą numerycznego rozwiązywania równania Schrödingera dla ruchu protonów*, **Mateusz Brela**

• **Komunikaty:**

1. ICTchem, Kraków, Poland 19.03-20.03.2011. “Cache-Aware Load-Balancing. Algorithm for Computational Chemistry Applications”, **Mateusz Brela**, Grzegorz Mazur, Marcin Makowski.
2. KUKDM, Konferencja Użytkowników Komputerów Dużej Mocy, Zakopane, Poland, 28.02– 1.03.2013 *Molecular modeling of the alkaline anionic exchange membranes for fuel cells*, **Mateusz Brela**, Artur Michalak.

3. KUKDM, Konferencja Użytkowników Komputerów Dużej Mocy, Zakopane, Poland, 12.03– 14.03.2014, *Olefin polymerization activity by electronic alteration on proximate of phenyl phenoxy ligand in half-metallocene titanium(IV) complexes*, **Mateusz Brela**, Artur Michalak.
4. KUKDM, Konferencja Użytkowników Komputerów Dużej Mocy, Zakopane, Poland, 11.03– 13.03.2015, *Theoretical analysis of ion-polymer interactions in PBI-based membranes with ETS-NOCV method*, **Mateusz Brela**, Artur Michalak.
5. KUKDM, Konferencja Użytkowników Komputerów Dużej Mocy, Zakopane, Poland, 17.03– 18.03.2016, *Theoretical Study on the Electronic Structure and Properties of the PBI- and Tetrazole-Derived Polymers for Fuel-Cell Applications*, **Mateusz Brela**, Karol Dyduch, Dirk Henkensmeier, Artur Michalak
6. „59 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego” Poznań, 19-23.09.2016, *Analiza oddziaływania pomiędzy przeciw-jonem a łańcuchem polimerowym zbudowanym z jednostek benzimidazolowych*, **Mateusz Brela**, Artur Michalak.
7. KUKDM, Konferencja Użytkowników Komputerów Dużej Mocy, Zakopane, Poland, 8.03– 10.03.2017, *A Posteriori Quantization of the Nuclear Motion by Backfill Calculations*, **Mateusz Brela**.

•Pozostałe prezentacje plakatów:

1. Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Mariapfarr, Austria, 2–5.09.2012, *Molecular modeling of the alkaline anionic exchange membranes for fuel cells*, Mateusz Brela, Artur Michalak.
2. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego oraz Stowarzyszenia Inżynierów i Techników Przemysłu Chemicznego, Białystok, Polska, 16-21.09.2012, *Molecular modeling of the alkaline anionic exchange membranes for fuel cells*, Mateusz Brela, Artur Michalak.
3. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków, 6–8.12.2012. *Olefin Polymerization Activity by Electronic Alteration of Phenyl Phenoxy Ligand in Half-Metallocene Titanium(IV) Complexes*, Mateusz Brela, Monika Srebro, Artur Michalak.
4. Ogólnopolskie Forum Chemii Nieorganicznej, Kraków, 6–8.12.2012. *Teoretyczny opis mechanizmu reakcji odwodornienia borazanu w oparciu o kompleksy Niklu i Palladu*, Mariusz Paweł Mitoraj, Mateusz Brela, Łukasz Piękoś, Artur Michalak.

5. 7th Molecular Quantum Mechanics, Lugano, Szwajcaria, 2–7.06.2013, *Molecular modeling of the polybenzimidazolium-based membranes for alkaline fuel cells*, Mateusz Brela, Artur Michalak.
6. Workshop on Polymer Ion Exchange Membranes, Bad Zwischenahn, Niemcy, 27–28.06.2013, *Molecular modeling of the polybenzimidazolium-based membranes for alkaline fuel cells*, Mateusz Brela, Artur Michalak.
7. Workshop on Ion Exchange Membranes Applications, Bad Zwischenahn, Niemcy, 17–18.06.2014, *Molecular Modeling of the alkaline anionic exchange membranes for fuel cells*, Mateusz Brela, Karol Dyduch, Artur Michalak.
8. Modeling & Design of Molecular Materials 2014, Kudowa Zdrój, 29.06–3.07.2014, *Theoretical study on structure-activity relationships in ethylene polymerization catalyzed by half-metallocene titanium(IV) complexes*, Mateusz Brela, Monika Srebro, Artur Michalak.
9. Modeling & Design of Molecular Materials 2014, Kudowa Zdrój, 29.06–3.07.2014, *ETS-NOCV description of changes in the electronic structure along the reaction path of the double proton transfer in the formamide dimer and related systems*, Piotr Talaga, Mateusz Brela, Artur Michalak.
10. Modeling & Design of Molecular Materials 2014, Kudowa Zdrój, 29.06 – 3.07.2014, *Comparison of the reaction electronic flux and ETS-NOCV picture of the HCN-CN₂ isomerization reaction assisted by water*, Silvia Diaz, Mateusz Brela, Artur Michalak.
11. WATOC 2014, Santiago de Chile, 5–10.2014, *Olefin Polymerization Activity by Electronic Alteration on Proximate of Phenyl Phenoxy Ligand in Half-Metallocene Titanium(IV) Complexes*, Mateusz Brela, Monika Srebro, Artur Michalak.
12. WATOC 2014, Santiago de Chile, 5–10.2014, *Theoretical analysis of ion-polymer interactions in PBI-based membranes with ETS-NOCV method*, Mateusz Brela, Artur Michalak.
13. EMEA2015, Bad Zwischenahn, Niemcy, 22-24.06.2015, *Theoretical analysis of ion-polymer interactions in PBI-based membranes with ETS-NOCV method*, Mateusz Brela, Artur Michalak.
14. MIB2015, Praga, 14-18.09.2015 *Influence of the ionic/covalent character of the interaction on the properties of polymeric materials: example of polybenzimidazole(PBI) - based systems*, Mateusz Brela, Artur Michalak

15. EMEA2016, Bad Zwischenahn, Niemcy, 27-29.06.2016, *Theoretical analysis of ion-polymer interactions in PBI-based membranes with ETS-NOCV method*, Mateusz Brela, Artur Michalak
16. CTTC VIII Kraków, 4-8.09.2016, *Theoretical modeling of PBI-based membranes for fuel-cell applications* Mateusz Brela, Artur Michalak.

Dodatkowo współautorstwo 10 komunikatów oraz ponad 15 plakatów prezentowanych na konferencjach krajowych i zagranicznych przez doktorantów lub studentów, którymi się opiekowałem.

8. Informacja o udziale w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji.

Current Trends in Theoretical Chemistry VII 4-8 September 2016, Kraków, Poland, member of Executive Committee.

9. Informacja o uczestnictwie w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.

- **Kierownik:**

- 05/2020 Konkurs pt. "Mini-granty badawcze dla młodych naukowców i doktorantów Wydziału Chemii UJ, projektu SciMat" w ramach programu strategicznego Inicjatywa Doskonałości w Uniwersytecie Jagiellońskim, kierownik projektu: „Badanie metodami hybrydowymi dynamiki molekularnej kinetycznego efektu izotopowego wybranych reakcji enzymatycznych”.
- 10/2020 DECI-16, kierownik projektu, “COMPENZ” Computational Enzymology II by PRACE, przyznanie zasobów obliczeniowych EPCC (Wielka Brytania).
- 05/2019 DECI-15, kierownik projektu, “NEUROENZ” Computational Enzymology by PRACE, przyznanie zasobów obliczeniowych CSC (Finlandia).
- 03/2019 Miniatura 2, kierownik projektu pt. „Badanie reakcji rozkładu biogenego dopaminy w obecności oksydazy monoaminowej B za pomocą metody EVB (Empirical Valence Bond)”, 2018/02/X/ST4/02909.
- 2018 Wydziałowy Fundusz Projektów Habilitacyjnych, kierownik projektu: *Badanie zależności pomiędzy charakterem wiązań wodorowych w wybranych polimerach krystalicznych a ich właściwościami fizykochemicznymi*; K/DSC/005140.
- 2015 Wydziałowy Fundusz Projektów Doktoranckich, kierownik projektu badawczego: *Zastosowanie metody ETS-NOCV w oparciu o obliczenia DFT w podejściu statycznym i dynamicznym w modelowaniu struktury elektronowej i reaktywności układów o potencjalnym zastosowaniu w membranach przewodzących protony w Protonowych Ogniwach Paliwowych*, K/DSC/002838.

- **Wykonawca:**
- 2020 Wykonawca w projekcie NCN, OPUS 19: „Zmodyfikowane glikozaminoglikany jako nanonośniki substancji bioaktywnych”, 2019/35/B/ST5/02147, kierownik: dr hab. Mariusz Kępczyński, prof. UJ.
- 2017 – 2020 Wykonawca w projekcie NCN, OPUS 11: „Badania spektroskopowe układów z wiązaniami wodorowymi”, 2016/21/B/ST4/02102, kierownik: prof. dr hab. Marek J. Wójcik.
- 2012 – 2014 Stypendium: „International PhD - Studies Programme at the Faculty of Chemistry Jagiellonian University – New Materials – Modern Technologies – Sustainable Concepts”, kierownik: prof. dr hab. Jacek Młynarski, opiekun: prof. dr hab. Artur Michalak.
- 2012 – 2015 Wykonawca w granie badawczym: “Membrany przewodzące aniony do zastosowań związanych z energią” w ramach programu KORANET (NCBiR), kierownik: prof. dr hab. Artur Michalak.
10. Członkostwo w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.
- Członek Polskiego Towarzystwa Chemicznego.
11. Informacja o odbytych stażach w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.
- 08/2019 – 09/2019 prof. Janez Mavri, National Institute of Chemistry, Slovenia, visiting researcher, jeden miesiąc.
- 08/2018 prof. Janez Mavri, National Institute of Chemistry, Slovenia, visiting researcher, dwa tygodnie.
- 11/2017 prof. Yukihiro Ozaki, Kwansei Gakuin University, Sanda, Japan visiting researcher, dwa tygodnie.
- 10/2016 – 11/2016 prof. Yukihiro Ozaki, Kwansei Gakuin University, Sanda, Japan visiting researcher, dwa miesiące.
- 08/2016 prof. Janez Mavri, National Institute of Chemistry, Slovenia, visiting researcher, dwa tygodnie.
- 08/2013 – 02/2014 prof. Tom Ziegler, University of Calgary, Calgary, Canada, Scholarship: „International PhD - Studies Programme at the Faculty of Chemistry Jagiellonian University – New Materials – Modern Technologies – Sustainable Concepts”, sześć miesięcy.
- 08/2011 - 09/2011 prof. Janez Mavri, National Institute of Chemistry, Slovenia, short term contract: “Independent researcher”, dwa miesiące.
- 09/2010 - 12/2010 prof. Janez Mavri, Ljubljana University, Faculty of Pharmacy, Slovenia, ERASMUS scholarship, trzy miesiące.

12. Informacja o recenzowanych pracach naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.

Łącznie przygotowałem recenzje do 60 prac naukowych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym:

- Chemical Physics Letters – 1 recenzja;
- Journal of Composites Science — Open Access Journal – 1 recenzja;
- Journal of Materials Chemistry C – 1 recenzja;
- Journal of Molecular Modeling – 8 recenzji;
- Journal of Molecular Structure – 42 recenzji;
- Materials – 2 recenzje;
- Molecules – 2 recenzje;
- RSC Advances – 2 recenzje;
- Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy – 13 recenzji;
- The Journal of Physical Chemistry B – 1 recenzja;

III. INFORMACJA O WSPÓŁPRACY Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

1. Uzyskane prawa własności przemysłowej, w tym uzyskane patenty, krajowe lub międzynarodowe.

KR 10-2015-0055518, Dirk Henkensmeier, Jong Hyun Jang, Hyoung-Juhn Kim, Jin-Young Kim, Song-Pil Yoon, Jonghee Han, Suk-Woo Nam, Ngoc My Hanh Duong, Artur Michalak, Karol Dyduch, **Mateusz Brela**, *5-(2,6-dioxy-phenyl)tetrazole containing polymer, membrane, electrochemical device including the same and method for preparing the same.*

US20160308229 A1, Dirk Henkensmeier, Jong Hyun Jang, Hyoung-Juhn Kim, Jin-Young Kim, Song-Pil Yoon, Jonghee Han, Suk-Woo Nam, Ngoc My Hanh Duong, Artur Michalak, Karol Dyduch, **Mateusz Brela**, *5-(2,6-dioxy-phenyl)tetrazole containing polymer, membrane, electrochemical device including the same and method for preparing the same.*

Współautorstwo (jako jeden z mniej znaczących twórców) pakietu obliczeniowego Niedoida (<http://www2.chemia.uj.edu.pl/~niedoida>); Umowa o prawie do technologii z dnia 2.11.2016.

IV. INFORMACJE NAUKOMETRYCZNE


4. Informacja o liczbie punktów MNiSW.

Zestawienie danych bibliometrycznych**)	LP.	IF*	L ^{MEiN} ***
Publikacje stanowiące osiągnięcie naukowe w formie monotematycznego cyklu publikacji [H1-H10]	10	23,85	890
Autorstwo lub współautorstwo publikacji naukowych w czasopismach znajdujących się w bazie JCR (całkowity dorobek):			
A. Przed uzyskaniem stopnia doktora	9	36,274	960
B. Po uzyskaniu stopnia doktora	21	59,108	2090
C. Prace przeglądowe (rozdziały)	2	-----	
Łączna liczba publikacji (z rozdziałami)	30 (32)	95,382	3050
Łączna liczba cytowań (bez autocytowań) Web of Science			292 (239)
Łączna liczba cytowań (bez autocytowań) Scopus			305 (243)
Liczba cytowań cyklu [H1-H10] Web of Science			47
Liczba cytowań cyklu [H1-H10] Scopus			54
<i>h-index (Scopus)</i>			10

*** Na podstawie: Załącznika do komunikatu Ministra Edukacji i Nauki z dnia 9 lutego 2021 r.

** Stan na dzień 07.04.2021

*IF z roku 2019


(podpis wnioskodawcy)