

Dr hab. Mirosław Jabłoński, prof. UMK  
Zakład Chemii Kwantowej i Spektroskopii Atomowej  
Wydział Chemii  
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu  
ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń  
tel. +48 (56) 611 46 95  
e-mail: teojab@chem.umk.pl



UNIWERSYTET  
MIKOŁAJA KOPERNIKA  
W TORUNIU  
Wydział Chemii

Toruń, 16.11.2021

**Ocena dorobku naukowego dra Mateusza Breli  
oraz jego osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę  
przewodu habilitacyjnego, przedstawionego pod tytułem**

**„Kwantowo-chemiczne badanie dynamiki ruchu protonu w mostkach wodorowych w wybranych  
kryształach, polimerach oraz układach biologicznych.”**

Niniejszą recenzję sporządziłem w związku z powołaniem mnie na recenzenta w postępowaniu habilitacyjnym wszczętym na wniosek dr. Mateusza Breli, o czym informuje pismo Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Jagiellońskiego z dnia 30 września 2021 r. Ocenę dorobku habilitacyjnego oraz całokształtu działalności naukowej przeprowadziłem w oparciu o ustawę z dnia 20 lipca 2018 r. *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz. U. z 2018 r. poz. 1668 ze zm.).

**\*\*\* Sylwetka naukowa habilitanta \*\*\***

Pan dr Mateusz Brela ukończył studia chemiczne na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w roku 2011, broniąc pracy magisterskiej pod tytułem „*Analiza wibracyjna inhibitorów na przykładzie 2-hydroksy-5-nitrobenzamidów metodami ab-initio (DFT) oraz metodami dynamiki molekularnej.*”, napisanej pod kierownictwem dr hab. Marka Boczara, prof. UJ. Następnie, w roku 2015, uzyskał tytuł doktora nauk chemicznych w dyscyplinie *chemia* i specjalności *chemia teoretyczna*, broniąc na tym samym Uniwersytecie dysertacji doktorskiej pt.: „*Zastosowanie metody ETS-NOCV w oparciu o obliczenia DFT w podejściu statystycznym i dynamicznym w modelowaniu struktury elektronowej i reaktywności układów o potencjalnym znaczeniu technologicznym*”, tym razem napisanej pod kierownictwem prof. dr hab. Artura Michalaka. Od roku 2015 Pan dr Mateusz Brela jest zatrudniony na Wydziale Chemii UJ, początkowo w latach 2015–2017 na stanowisku pracownika inżynierjno-technicznego, a od roku 2017 na stanowisku adiunkta. W latach 2017–2019 pracował także w Akademickim Centrum Komputerowym Cyfronet (AGH) jako pracownik techniczny i specjalista ds. oprogramowania naukowego używanego na komputerach dużej mocy. Praktycznie zatem **cała kariera naukowa dra Mateusza Breli związana jest z Wydziałem Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego.**

**\*\*\* Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej oraz dorobku naukowego \*\*\***

Rozprawę habilitacyjną dr. Mateusza Breli stanowi cykl 9 publikacji (H1-H9) indeksowanych w bazie Journal Citation Reports (JCR) oraz rozdział w książce (H10) wydawnictwa (*Springer Nature*) o zasięgu międzynarodowym. Prace te zostały opublikowane w latach 2016–2020 w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym: *Spectrochimica Acta Part A* (2 artykuły), *The Journal of Physical Chemistry B* (2 artykuły), *Chemical Physics Letters* (2 artykuły), *Molecules* (1 artykuł), *The Journal of Physical Chemistry A* (1 artykuł), *International Journal of Quantum Chemistry* (1 artykuł).

Wartości współczynnika oddziaływania (IF) tych czasopism (według roku wydania pracy) wahają się od 1,747 do 3,267, co daje dość dobrą wartość średnią 2,65, przy sumarycznej wartości 23,85. Niestety brakuje publikacji samodzielnych. Co więcej wszystkie publikacje są wieloautorskie (5–8 autorów). Nawet rozdział w książce (H10) posiada 4 autorów, co moim zdaniem jest dość osobliwe. Habilitant w 8 publikacjach oraz we wspomnianym rozdziale jest jednak pierwszym autorem. Dodatkowo, co ważne, jest autorem korespondencyjnym w 7 z tych dzieł. Udział własny został przez Habilitanta oceniony na 51–60%, a tylko w jednej pracy (8-autorskiej) wynosi on 33%, zatem można przyjąć, iż jest on w przedstawionych pracach dominujący. Mankamentem jest raczej umiarkowana liczba cytowań (zaledwie 48). Ponadto nie jest jasne, czy liczba nie zawiera także autocytowań. Pewnym usprawiedliwieniem może tu być zapewne fakt, iż prace H1-H9 zostały napisane stosunkowo niedawno (2016–2020).

Na podstawie autoreferatu i załączonych publikacji można stwierdzić ogólnie, że Pan dr Mateusz Brela wykorzystywał zaawansowane (np. dodatkowe uwzględnienie kwantowego opisu ruchu protonów) metody tzw. dynamiki molekularnej *ab initio* (MD w jej wariantach CPMD i BOMD) do opisu międzycząsteczkowych wiązań wodorowych obecnych w kryształach różnych związków organicznych i większych polimerów. Przy czym w szczególności głównym celem była interpretacja ich 'odcisku' spektroskopowego IR. Niestety pomimo tego, że autoreferat został napisany dość przejrzysto (np. stosowanie odpowiednich podpunktów), to jednak opis publikacji H1-H10 nie jest chronologiczny (H1, H6, H2, H9, H7, H5, H3, H8). W ten sposób Habilitant niestety nie opisał treści artykułów H4 i H10. Do tych pozycji odniósł się dopiero w podsumowaniu. Ponadto opis pozycji z cyklu przeplata się z opisem treści publikacji spoza cyklu H1-H10, co niekiedy utrudnia zapoznanie się z ocenianym dorobkiem Habilitanta. Dodatkowo opis treści samych prac z cyklu H1-H10 jest dość skąpy. Brakuje na przykład wyraźnego opisu najważniejszych osiągnięć, które można praktycznie jedynie znaleźć w dodatkowym punkcie 10.6 (Najważniejsze osiągnięcia) pod koniec autoreferatu. Z tego powodu konieczna była wnikliwa analiza samych publikacji H1-H10. Autoreferat zawiera także dość liczne błędy językowe (wystarczy wspomnieć użyte (podpis do rysunku 10.4.4.4) sformułowania „struktury elektronicznej” i „orbity molekularnej”).



## Szczegółowa treść prac H1-H10

Stosując dynamikę molekularną Borna-Oppenheimera (BOMD) połączoną z kwantowym opisem ruchu protonów w mostkach wodorowych O-H...O, w artykule **H1** Habilitant opisał dynamikę ruchu protonów w wiązaniach wodorowych O-H...O w formach I i II aspiryny (tj. kwasu acetylosalicylowego). Badania te pokazały, że tylko w formie I zachodzi spontaniczny transfer protonu z utworzeniem wiązania O...H-O oraz że wiązanie wodorowe w tej formie jest silniejsze. Podobne obliczenia, wykonane dla kryształu tropolonu, zostały opisane w artykule **H6**. Dodatkowo jednak analizowane były także zmiany w lokalizacji orbitali HOMO i LUMO, które zachodzą podczas prowadzonej symulacji. Pozwoliło to na badanie sprzężenia pomiędzy elektronami  $\pi$  pierścienia tropolonu i jego atomami tlenu. Symulacje MD pokazały, że atom wodoru w międzycząsteczkowym mostku O-H...O' jest zlokalizowany blisko atomu O. Chociaż pokazano, że delokalizacja/lokalizacja HOMO zależy od płaskości dimeru tropolonu, to jednak nie zostały zasugerowane żadne praktyczne korzyści wynikające z tego wyniku. W nieco wcześniejszej pracy **H2** obiektem badań był natomiast kryształ kwasu benzoowego. Główny nacisk położono jednak na otrzymane za pomocą metody MD widma IR, które pozwoliły na wnikliwą analizę wpływu stopnia podstawienia izotopowego H  $\rightarrow$  D na sprzężenia w wiązaniach wodorowych O-H...O. Badania te pokazały niezależność ruchów O-H i O-D w tych wiązaniach. Chociaż praca **H2** została przez Habilitanta opisana dość powierzchownie, to jednak jest ona świetnym źródłem informacji na temat metodologii stosowanej podczas teoretycznej (za pomocą BOMD) symulacji widm IR i wpływu podstawienia izotopowego. W pracy tej po raz pierwszy zastosowano analizę głównych składowych (PCA) deuterowanych dimerów kwasu benzoowego. Wykazano niezależność ruchów O-H i O-D.

W artykułach **H7** i **H9** Pan dr Mateusz Brela zastosował dynamikę molekularną Borna-Oppenheimera (BOMD) do opisu sieci wiązań wodorowych w kryształach adeniny i tyminy (**H9**) oraz guaniny i cytozyny (**H7**). Obliczenia te w połączeniu z wyznaczonymi doświadczalnie i teoretycznie widmami IR pokazały, że wiązania wodorowe w adeninie są bardziej stabilizowane i silniejsze niż w tyminie, co przekłada się na wyższą temperaturę topnienia adeniny (633–638 K) w porównaniu do temperatury topnienia tyminy (590 K). Habilitant zwrócił także uwagę na różnice w przestrzennym usieciowaniu wiązań wodorowych w kryształach tych związków, trójwymiarowe (3D) w adeninie vs dwuwymiarowe (2D) w tyminie. Wynik ten nasuwa pytanie: dlaczego silniejsze wiązania wodorowe w kryształach adeniny fluktuują znacznie bardziej aniżeli znacznie słabsze wiązania wodorowe w kryształach tyminy? Niestety odpowiedzi nie znalazłem także w samej publikacji **H9**. Tytuł punktu 4.3. w tej publikacji odnosi się do kryształów guaniny i cytozyny, które były tematem nieco wcześniejszej pracy **H7** (2019 r. vs 2020 r.). Niestety sugeruje to kopiowanie fragmentów tekstu pomiędzy publikacjami. Rzeczywiście, punkt 4.3. w artykule **H7** brzmi niemal identycznie. Dodatkowo, układ, nazwy podrozdziałów, a co gorsza dłuższe fragmenty tekstu (np. pierwszy akapit wstępu) w tych publikacjach są także niemal identyczne. Pokazuje to, moim zdaniem, **pewną automatyczność w pisaniu artykułów, a częściowo także prowadzonych badań (o czym później)**. W przypadku drugiej pary komplementarnych zasad, tj. guanina-cytozyna, pokazano, iż wiązania wodorowe w kryształach guaniny są silniejsze od oddziaływań w kryształach cytozyny. To odkrycie zostało powiązane z zygzakowaną strukturą kryształu cytozyny, co znacznie utrudnia przepływ ładunku pomiędzy pojedynczymi cząsteczkami. Ponownie, słabsze wiązania wodorowe w kryształach cytozyny tłumaczą jej niższą temperaturę topnienia (593–598 K vs 633 K dla guaniny). Należy wspomnieć, że w obu pracach, tj. **H9** i **H7**, po raz



pierwszy zastosowano możliwość analizy zmian deformacji gęstości elektronowej, zachodzących w trakcie symulacji MD, w celu wykazania różnic w stabilności kryształów.

Opisana metodologia badawcza została także zastosowana do analizy wiązań wodorowych w polimerach krystalicznych. Przykładem są międzycząsteczkowe wiązania wodorowe N-H...O w formach  $\alpha$  i  $\gamma$  Nylonu 6, opisane w artykule **H5**, oraz C-H...O=C w kryształach poliwodoromaślanu (PHB), opisanego w pracy **H3**. W pierwszym przypadku, obliczenia bazujące na BOMD połączone z kwantowym opisem protonu w międzycząsteczkowych wiązaniach wodorowych N-H...O, pokazały, że wiązania te są nieco silniejsze w formie  $\gamma$ . Na wniosek ten wskazują mniejsze (po uśrednieniu) odległości H...O i N...O jak i niewielkie przesunięcie maksimum pasma drgania N-H formy  $\gamma$  w kierunku niższych wartości (tzw. red-shift). Wynik ten został powiązany z większą liczbą wiązań wodorowych w tej formie. W pracy **H3** pokazano natomiast, że występujące w kryształach poliwodoromaślanu międzycząsteczkowe wiązania wodorowe C-H...O=C są dynamiczne, co wynika głównie z obrotów grup metylowych. Stosując kwantowy opis ruchu atomu tlenu, w pracy tej wyznaczono także położenie pasma charakteryzującego grupę C=O. Moim zdaniem sama publikacja **H3** ma sporo niedociągnięć edytorskich. Na przykład, omawiane wiązania C-H...O są na rysunku 3 (Fig. 3 w **H3**) kompletnie niewidoczne. Wyniki dotyczące symulacji zmiany odległości H...O są opisane bardzo skromnie. Zdarzają się także pewne powtórzenia i brak zachowania chronologii.

W przypadku pracy **H8**, Habilitant napisał, że „kolejnym etapem eksploracji kwantowej natury protonu było zastosowanie statystycznej mechaniki kwantowej do opisu zjawiska przeniesienia protonu wzdłuż wiązania wodorowego w reakcji benzyloaminy z monoaminooksydazą A (MAO A)”. Jednak należy tu wspomnieć, że w samym artykule (jak i jego opisie w autoreferacie) dość ciężko jest owego wiązania wodorowego się doszukać, gdyż brakuje jakiegokolwiek nawiązania do tego oddziaływania. W samym artykule **H8** mowa jest także o przeniesieniu jonu wodorkowego („hydride anion”) a nie protonu. Dlatego brak ilustracji tego wiązania wodorowego w autoreferacie, jak i szerszego opisu reakcji deaminacji należy uznać za niedociągnięcie Habilitanta. Sama praca **H8** także, moim zdaniem, jest dość skromna. Choć Habilitant uważa, iż obliczenia teoretyczne (6,45 +/- 1,37) dość dobrze odtworzyły doświadczalną (8,2–10,1) wartość kinetycznego efektu izotopowego (KIE), to jednak wniosek ten wydaje mi się nieco przesadzony. Co ważne, badania te pokazały, że enzymatyczna reakcja deaminacji benzyloaminy zachodzi około 6 razy szybciej dla izotopomeru z H aniżeli z D.

W „zapomnianej” pracy **H4** Habilitant opisał sieć międzycząsteczkowych wiązań wodorowych w kryształach uracylu oraz jego dwóch prostych pochodnych: 1-metylouracylu i 1-metylo-4-tiouracylu. Choć w pracy tej także została zastosowana dynamika molekularna Born-Oppenheimera (BOMD), to jednak tylko w celu wyznaczenia teoretycznego widma IR rozważanych związków, dlatego artykuł ten dość słabo wpisuje się w wybrany temat osiągnięcia naukowego, który powinien dotyczyć badania ruchu protonu w mostku wodorowym a więcej jego opisu kwantowego. Niemniej jednak podczas przeprowadzanych symulacji protony mostkowe ulegają przemieszczeniom (niestety zmian odległości H...Y nie pokazano), więc można założyć, że pewien związek **H4** z ustalonym tematem jest. Przedstawione w tej pracy wyniki odbieram jednak jako nieco „jałowe”. Do głównych konkluzji Habilitant zalicza np. pokazanie, że metylowe pochodne uracylu zmieniają kompletnie (to wyrażenie jest raczej na wyrost) sieć wiązań wodorowych w kryształach. Świetnie, ale co z tego? Jest raczej oczywiste, że jakieś podstawienie w cząsteczce może zmienić sieć oddziaływań w kryształach. Tak jest dość często i nie jest to żadne odkrycie. Poza tym w konkluzjach artykułu **H4** czytamy, że obie metylowe pochodne uracylu tworzą w analizowanej warstwie 2D struktury



dimerowe. Jest to, moim zdaniem, stwierdzenie dość wątpliwe, bo (i) obraz gęstości deformacyjnej dla 1-metylouracylu jest bardziej zbliżony do odpowiedniego obrazu dla samego uracylu aniżeli 1-metylo-4-tiouracylu (ii) otrzymany obraz (i konkluzje) może zależeć od wybranego fragmentu A. W pracy jest także mowa o tym, że obraz oddziaływania dla 1-metylouracylu jest podobny („results agree”) do tego z uracylu, jednak w przypadku uracylu nie widać wiązań wodorowych pomiędzy cząsteczkami 5-4. Uważam, że omówienie wyników w tej publikacji (i w kilku innych) powinno być bardziej staranne. Co do samego osiągnięcia, to, poza niewątpliwie istotną kolejną demonstracją możliwości wyznaczenia widma IR za pomocą metody BOMD, nie widzę tu żadnego.

**H10** to natomiast 4-autorski rozdział w książce *Frontiers of Quantum Chemistry*, który w przeglądowy sposób opisuje przykłady wykorzystania dynamiki molekularnej do opisu widm spektroskopii IR, przy czym opisywane związki zawierały wiązania wodorowe. Niestety „Przedmowa” autoreferatu Habilitanta jest w dużej mierze dość wiernym tłumaczeniem wstępu z tej pozycji, co pokazuje, że Habilitant zastosował podejście „pójścia na skróty”. Pomimo tego, że Habilitant zadeklarował napisanie „wstępnej wersji manuskryptu” **H10**, to nie jest jednak jasne, na ile ta wersja była bliska końcowej wersji wysłanej do wydawnictwa.

### Ogólne konkluzje dotyczące badań opisanych w cyklu H1-H10

Prace **H1-H10**, wchodzące w cykl dorobku naukowego Pana dr. Mateusza Breli, w spójny i wzajemnie uzupełniający się sposób niewątpliwie pokazują, że międzycząsteczkowe wiązania wodorowe (i, jak miemam, wiele innych typów oddziaływań) mogą z powodzeniem być opisywane za pomocą metod dynamiki molekularnej. Szczególnie cennym osiągnięciem jest zademonstrowanie, w oparciu o wiele przykładów, że doświadczalne widmo IR może być z dużą dokładnością odtworzone za pomocą metod teoretycznych. Co więcej, w wielu przypadkach metody te pozwalają na bardziej wnikliwą analizę poszczególnych pasm aniżeli pozwalają na to metody spektroskopii IR. Ponadto, możliwa jest także analiza wpływu podstawienia izotopowego H→D czy uwzględnienia kwantowej natury protonu w mostku wodorowym. Są to z pewnością istotne osiągnięcia łączące możliwości obecnej teoretycznej chemii obliczeniowej z chemią doświadczalną, głównie natomiast spektroskopią IR. Niestety, głębsza analiza samych prac **H1-H10** pokazuje (lub przynajmniej sugeruje) także **pewną automatyczność prowadzonych przez dr. Mateusza Brela badań naukowych**. Mam wrażenie, że niejednokrotnie niemalże jedynym celem Jego badań była demonstracja powyższych możliwości, włączając w to konieczność odtworzenia doświadczalnego widma IR badanych układów. **Brakuje natomiast próby poszukania bardziej praktycznych zastosowań tych, jednak z pewnością istotnych, możliwości.**

### Inne wyniki, poza habilitacją

Na pozostałe (tj. niewchodzące w cykl **H1-H10**) osiągnięcia naukowo-badawcze dr. Mateusza Breli składają się 21 artykuły (P1-P21), rozdział w książce *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach* oraz 2 zgłoszenia patentowe. Jest to dorobek raczej umiarkowany.

### \*\*\* Ocena działalności naukowej oraz dane bibliometryczne \*\*\*

Dorobek naukowy dr. Mateusza Breli obejmuje **30 publikacji naukowych** w czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej, co jest wynikiem dość umiarkowanym. Jednak ich łączny współczynnik oddziaływania (*Impact Factor*; **IF**) to **93,35**, co daje dość dobrą wartość **średnią** wynoszącą **3,1 na publikację**. Jak zaznaczono wcześniej, do cyklu stanowiącego osiągnięcie naukowe Habilitanta zostało włączonych 9 publikacji o łącznym IF = 23,85, co daje średnią wartość 2,65. Wartość **indeksu Hirscha wynosi 10**, jest zatem umiarkowana.

**Wartości parametrów bibliometrycznych (indeks Hirscha wynosi 10; całkowita ilość cytowań (bez autocytowań) = 239/243 (WoS/Scopus)) oceniam jako umiarkowanie słabe.** Przy czym cytowalność samych prac z cyklu habilitacyjnego wynosi zaledwie 48 (wartość najprawdopodobniej zawiera także autocytowania).

Habilitant zadeklarował wygłoszenie **2 wykładów na zaproszenie** (Japonia, Polska) oraz **7 komunikatów**, głównie na cyklicznej Konferencji Użytkowników Komputerów Dużej Mocy (KUKDM) w Zakopanem. Dodatkowo zaprezentował **19 posterów**, z których 3 zostały nagrodzone. Poza tym był także współautorem 10 komunikatów oraz 15 plakatów prezentowanych przez doktorantów lub studentów, którymi się opiekował. Biorąc pod uwagę fakt, że wystąpienia te miały miejsce głównie przed okresem zatrudnienia na etacie naukowym, przytoczone wartości wskazują na dość dużą aktywność Habilitanta.

Pan dr Mateusz Brela **odbył kilka krótkoterminowych staży** naukowych w Słowenii (prof. Janez Mavri), Japonii (dr Takahito Nakajima, prof. Yukihiko Ozaki, prof. Harumi Sato) oraz w Kanadzie (prof. Tom Ziegler), czego wynikiem były wspólne publikacje, także wchodzące w zakres prezentowanego cyklu.

Pomijając wewnętrzne projekty wydziałowe oraz międzynarodowe projekty obliczeniowe (PRACE), Pan dr Mateusz Brela był **kierownikiem projektu Miniatura 2**. Poza tym Habilitant był lub jest wykonawcą 1 grantu (KORANET) NCBiRu oraz 2 projektów NCN (OPUS 11 i OPUS 19).

Habilitant zadeklarował recenzowanie 60 prac naukowych, głównie w *Journal of Molecular Structure* oraz *Spectrochimica Acta A*.

### \*\*\* Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej \*\*\*

Pan dr Mateusz Brela był lub jest promotorem 7 prac licencjackich, a obecnie jest opiekunem 2 prac magisterskich, co pokazuje, iż **ma On doświadczenie w kształceniu młodej kadry naukowej**. Poza tym jest promotorem pomocniczym w 2 otwartych przewodach doktorskich. Habilitant prowadzi na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego wykłady z zastosowania spektroskopii molekularnej oraz różne ćwiczenia rachunkowe, konwersatoria i laboratorium. Habilitant działa także na rzecz Uniwersytetu Jagiellońskiego, np. obecnie jest Członkiem Kolegium Elektorów Uniwersytetu Jagiellońskiego. Za prowadzoną działalność naukową Habilitant otrzymał nagrodę FNP START. Jest On także laureatem laudacji studenckich w kategorii „mentor studenta”.



**\*\*\* Konkluzja \*\*\***

Zaprezentowana tutaj konkluzja jest wypadkową trzech składowych: (1) ocena wartości parametrów bibliometrycznych, (2) tematyka prowadzonych badań naukowych, dorobek naukowy oraz wkład w rozwój reprezentowanej przez Habilitanta dyscypliny naukowej, (3) ocena aktywności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej. Same **wartości parametrów bibliometrycznych oceniam jako umiarkowane**. Pomimo bycia współautorem dość dobrych ( $IF_{\text{sr}} = 3.1$ ) publikacji, liczba cytowań (ok. 240) nie jest imponująca, podobnie jak indeks Hirscha (= 10), który jest jednym z najważniejszych wskaźników opiniotwórczych.

Jednak niewątpliwie **pozytywną stroną dorobku naukowego** Habilitanta **jest tematyka** Jego badań **oraz ich znaczenie**. Nie mam wątpliwości, że Pan dr Mateusz Breła biegle opanował umiejętność wykorzystywania zaawansowanych metod dynamiki molekularnej w celu teoretycznego wyznaczania widm spektroskopii IR dla szerokiego zakresu układów z międzycząsteczkowymi wiązaniami wodorowymi. Co ważne, nie tylko wyniki Habilitanta są w zgodzie z wynikami doświadczalnymi, ale często prowadzone przez Niego badania teoretyczne są w stanie wyjaśnić (np. poprzez właściwy opis kwantowej natury protonu) subtelności widm doświadczalnych. Niestety, na podstawie szerszej analizy samych publikacji z cyklu **H1-H10**, mam wrażenie, że chęć odtworzenia widm doświadczalnych przez wyznaczone metodami dynamiki molekularnej widma teoretyczne stała się głównym celem prowadzonym przez Habilitanta badań naukowych. Co więcej, **dostrzegalna jest także pewna automatyczność prowadzonych badań**. Dlatego zachęcam Habilitanta do rozszerzenia spektrum badanych zagadnień i stosowanych technik, a także do zastanowienia się nad bardziej praktycznymi celami swoich badań. Pozostałe osiągnięcia naukowe, działalność dydaktyczną i organizacyjną oceniam jako odpowiednie.

Podsumowując stwierdzam, że, przedstawione jako podstawa przewodu habilitacyjnego, osiągnięcie naukowe (cykl publikacji H1-H10) dra Mateusza Breli stanowi **istotny wkład w rozwój chemii oraz że osiągnięcie to jak i pozostały dorobek naukowy Habilitanta spełniają ustawowe** (*Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2018 r. poz. 1668 ze zm.)*) **wymogi formalne i zwyczajowe. W związku z tym uważam, że nadanie panu dr. Mateuszowi Breli stopnia doktora habilitowanego jest w pełni uzasadnione.**



Mirosław Jabłoński