

Prof. dr hab. Marcin Molski
Zakład Chemii Kwantowej
Wydział Chemii
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
61-614 Poznań

Poznań, 19.11.2021

Ocena dorobku i osiągnięcia naukowego

Pana dr. Mateusza Breli

będących podstawą wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego

1. Informacje podstawowe o Kandydacie

Pan Mateusz Breli ukończył studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (UJ) w 2011 roku, wykonując pracę magisterską „Analiza wibracyjna inhibitorów na przykładzie 2-hydroksy-5-nitrobenzamidów metodami ab-initio (DFT) oraz metodami dynamiki molekularnej” – promotorem był Prof. Marek Boczar. Na podstawie przygotowanej pod kierunkiem Prof. Artura Michalaka dysertacji „Zastosowanie metody ETS-NOCV w oparciu o obliczenia DFT w podejściu statycznym i dynamicznym w modelowaniu struktury elektronowej i reaktywności układów o potencjalnym znaczeniu technologicznym” nadano Kandydatowi w 2015 roku tytuł doktora nauk chemicznych, specjalność: chemia teoretyczna. W latach 2016-2019 dr Breli odbył pięć krótkoterminowych staży podoktorskich w ośrodkach zagranicznych, w tym trzy w National Institute of Chemistry w Słowenii oraz dwa w Kwansai Gakuin University w Japonii, natomiast przed doktoratem (2010-2014) uczestniczył w stażach w University of Calgary w Kanadzie (1) oraz w National Institute of Chemistry w Słowenii (2). W latach 2012-2020 był wykonawcą czterech krajowych grantów i projektów badawczych oraz kierownikiem kolejnych sześciu, w tym dwóch projektów zagranicznych. W latach 2015-2017 był pracownikiem inżynierjno-technicznym, 2017-2019 referentem, a od 2017 roku jest adiunktem w Zakładzie Chemii Fizycznej i Elektrochemii UJ. 27 kwietnia 2021 roku, na wniosek dr. Breli wszczęto postępowanie w sprawie nadania mu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne. Podstawą ubiegania się o stopień doktora habilitowanego jest cykl powiązanych tematycznie dziesięciu publikacji pod wspólnym tytułem: „Kwantowo-chemiczne badanie dynamiki ruchu protonu w mostkach wodorowych w wybranych kryształach, polimerach oraz układach biologicznych”. Rada Doskonałości Naukowej przyjęła wniosek o przeprowadzenie procedury i wskazała przewodniczącego oraz trzech recenzentów, a Rada Dyscypliny Nauki Chemiczne UJ powołała komisję habilitacyjną i nadała dalszy bieg sprawie.

2. Ocena aktywności naukowej (całkowity dorobek) Kandydata

2.1 Ocena liczebności dorobku i czasopism, w których publikowane były prace

Przed uzyskaniem stopnia doktora Kandydat był współautorem 9. publikacji w czasopiśmie o obiegu międzynarodowym, o sumarycznym IF=36,274 (średni IF=4,030), w tym w prestiżowym *Journal of Materials Chemistry A* (IF=11,301). Wszystkie osiągnięcia są bezpośrednio lub pośrednio powiązane zarówno z tematyką doktoratu, jak i pracy habilitacyjnej. Zgodnie z bazą *Web of Sciences* (WoS, 18.11.2021), prace te były cytowane 178 razy, a dane z autoreferatu wskazują, że Kandydat był głównym autorem trzech z nich (P3, P5,

P9). Po doktoracie Kandydat opublikował 23 prace, w tym dwie nowe, nie uwzględnione w autoreferacie: Kalka AJ, Brela MZ, Turek AM „Unravelling the nature of a toluene-fumaronitrile complex” *Physical Chemistry Chemical Physics* 23 (2021) 16128-16141 (IF=3,47); Goszczycki P, Stadnicka KM, Brela MZ, Ostrowska K „The origin of conformational solvatochromism in phenylmethylidene-bis (pyrrolo[2,3-b]quinoxaline) derivative” *Dyes and Pigments*, 193 (2021) 109475 (IF=4,889). Kandydat był głównym autorem jednej (P18) z 23 publikacji poza osiągnięciem, oraz dziewięciu (H1, H3-H10) w zakresie osiągnięcia. 21 prac opublikowanych po doktoracie plus 2 cytowane powyżej osiągnęły sumaryczny IF=67,467 (średni IF=2,933). Zgodnie z WoS były one cytowane 157 razy. W sumie dr Brela opublikował (jako współautor) 32 prace oryginalne w czasopiśmie naukowych o obiegu międzynarodowym oraz był współautorem dwóch rozdziałów w pracach przeglądowych, z których H10 został uwzględniony w osiągnięciu naukowym, natomiast rozdział w książce *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach* (Wiley-VCH, Weinheim 2019) został zaliczony do dorobku dodatkowego. Bibliometryczne dane z WoS wskazują, że 34. artykuły Kandydata były cytowane 335 razy (271 bez autocytowań) w 260 (243) publikacjach, osiągając średnią ilość cytowań 9,85 na pracę, co skutkowało wartością wskaźnika Hirscha $h=10$. Wszystkie publikacje są wieloautorskie, począwszy od artykułu P1 (3 autorów), a skończywszy na P6 i P8 (11). Zaktualizowany, sumaryczny IF=103,741 (średni IF=3,051) dla wszystkich zarejestrowanych przez WoS artykułów. Analiza dynamiki publikacyjnej wskazuje, że rosła ona systematycznie od 2011 roku (1 artykuł) osiągając maksimum w 2017 roku (7 artykułów), następnie zaczęła spadać 2018 (5), 2019 (5), 2020 (1) i nieznacznie rosła 2021(3). Z uwzględnieniem bezwładności obiegu publikacyjnego, trend ten był skorelowany ze wzrostem ilości cytowań, których maksimum przypadło na rok 2019 (69), po którym zauważalny jest regres: 2020 (57), 2021 (42). Najczęściej cytowane prace Kandydata to: “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” - publikacja w *Journal of Physical Chemistry B* w 2012 roku (48 cytowań), “Anion conducting polymers based on ether linked polybenzimidazole (PBI-OO)” *International Journal of Hydrogen Energy* (2014) (44 cytowania), “Polymorphism driven optical properties of an anil dye” *CRYSTEMGCOMM* (2016) (23 cytowania). Żadna z powyższych prac nie jest uwzględniona w pakiecie habilitacyjnym, dopiero artykuł H1 „Born-Oppenheimer Molecular Dynamics Study on Proton Dynamics of Strong Hydrogen Bonds in Aspirin Crystals, with Emphasis on Differences between Two Crystal Forms” *Journal of Physical Chemistry B* (2016) był cytowany 19. razy i znalazł się na 5. miejscu listy rankingowej WoS. W sumie, publikacje H1-H10 osiągnęły sumaryczny IF=23,85 (średni IF=2,385) i były cytowane 47 razy (Scopus - 54 razy). Podsumowując, analiza całkowitego dorobku naukowego wskazuje, że Kandydat nie ma żadnej pracy mono-autorskiej, a jego udział procentowy w powstaniu publikacji H1-H10 wynosi od 33 do 60 %; od 2017 roku nastąpił spadek ilości opublikowanych prac, a od 2019 ich cytowań. Zmniejszył się również średni IF=4,030 czasopism, w których Kandydat publikował prace przed doktoratem do IF=2,933 po doktoracie. To fakty i trendy niepokojące, natomiast IF czasopism oraz całkowita ilość cytowań przez innych badaczy dowodzą, że jest to dorobek dobrze funkcjonujący w obiegu międzynarodowym, dlatego spełnia zwyczajowe i formalne kryteria stawiane kandydatom do habilitacji w dyscyplinie naukowej chemia.

2.2. Wykaz ważniejszych osiągnięć naukowych z podsumowaniem, co one wnoszą do nauki

Do najważniejszych osiągnięć Kandydata w okresie jego działalności przed doktoratem zaliczam pracę P8 „Tetrazole substituted polymers for high temperature polymer electrolyte fuel cells” opublikowaną w 2015 roku w czasopiśmie *Journal of Materials Chemistry A* (IF=11,301), której dr Brela był jednym z współautorów. Tematycznie publikacja ta idealnie

wkomponowuje się we współczesne trendy proekologiczne i problem nadprodukcji ditlenku węgla i innych gazów, generowanych w trakcie spalania kopalin w elektrowniach, przemyśle i gospodarstwach domowych. Jednym z proponowanych rozwiązań tego istotnego dla przetrwania gatunku *Homo sapiens* problemu są ogniwa paliwowe. Cechuje je wysoka energooszczędność i wydajność w zakresie 40 - 60%, a w przypadku dodatkowego wykorzystania ciepła odpadowego, nawet 85%. Ogniwa paliwowe wytwarzają również o 97% mniej tlenków azotu w porównaniu z konwencjonalnymi elektrowniami węglowymi. W pracy P8 przedstawiono wyniki badań teoretycznych i eksperymentalnych nad poliarylenoeterami z ugrupowaniami tetrazolowymi przyłączonymi do bazowego szkieletu. Wykazały one, że polimery tetrazolowe są dobrymi kandydatami do produkcji membran stosowanych w ogniwach paliwowych, które mogą pracować w temperaturze do 160° C bez konieczności ich uciążliwego nawilżania i zwiększania ciśnienia. To istotny progres, ponieważ do czasu opublikowania P8 sądzono, że membrany z polimerowego elektrolitu na bazie tetrazolu wykazują wysokie przewodnictwo w znacznie niższej temperaturze 20 – 120°C. Praca P8 była cytowana 23 razy (WoS). Drugą wyróżniającą się pracą o podobnym aplikacyjnym charakterze (cytowana 44 razy) jest P6 „Anion conducting polymers based on ether linked polybenzimidazole (PBI-OO)” opublikowana w 2014 roku w czasopiśmie *International Journal of Hydrogen Energy* IF=4,939. W pracy tej przedstawiono wyniki badań nad polimerami metylowych pochodnych fenoksybenzimidazolu, w aspekcie ich stabilności mechanicznej i przewodnictwa. W szczególności przeanalizowano interakcje kationowo-anionowe pomiędzy bazowym monomerem i różnymi anionami przy zastosowaniu analizy dystrybucji ładunków i metody dynamiki molekularnej Borna-Oppenheimera (BOMD). Wśród badań prowadzonych po doktoracie, nie jestem w stanie wyróżnić tak spektakularnych osiągnięć jak te, prezentowane w pracach P6 i P8. Wszystkie artykuły H1-H10, wchodzące w skład pakietu habilitacyjnego oraz większość z prac P1-P21 dotyczą natury, funkcji i charakterystyki spektralnej wiązania wodorowego, które jest jednym z najważniejszych wiązań występujących w układach chemicznych i biologicznych. Są one odpowiedzialne za tworzenie i właściwości złożonych struktur, takich jak: DNA, RNA, enzymy, biopolimery i błony komórkowe. Właściwości wiązań wodorowych były szeroko badane zarówno teoretycznie, jak i doświadczalnie, a wyniki były prezentowane w kilku monografiach, cytowanych w autoreferacie. Zaproponowano kilka modeli teoretycznych stosowanych do opisu dynamiki wibracyjnej układów z wiązaniami wodorowymi, głównie związanej z drganiem rozciągającym grup -OH i -NH lub zginającym -COH, rejestrowanymi w widmie IR, Ramana oraz INS (Inelastic Neutron Scattering). Do najczęściej stosowanych i preferowanych w publikacjach H1-H10 metod obliczeniowych należy BOMD (Born-Oppenheimer Molecular Dynamics), która daje większe możliwości obliczeniowe w porównaniu z konkurencyjnym podejściem CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics), stosowanym przez Kandydata we wcześniejszych pracach P2, P3 i P9. Otrzymane wyniki wnoszą istotny wkład w rozumienie natury wiązania wodorowego i jego charakterystyki spektralnej w układach o znaczeniu biologicznym (adenina, cytozyna, guanina, tymina, uracyl), leczniczym (aspiryna, tropolon) i technologicznym (α,γ -Nylon-6, kwas 3-hydroksymasłowy PHB).

2.3 Udział Kandydata w publikacjach zbiorowych, przedstawionych jako osiągnięcie naukowe

Wszystkie publikacje H1-H10 przedstawione jako osiągnięcie naukowe są współautorskie, przy czym, w H1, H3-H10 dr Brela jest ich głównym autorem. Współautorem dziewięciu z dziesięciu prac Kandydata, przedstawionych jako osiągnięcie naukowe (podstawa habilitacji) był Prof. Marek Wójcik, a wszystkich publikacji Prof. Marek Boczar z Wydziału Chemii UJ. W stosownych oświadczeniach potwierdzają oni swój współudział w zakresie: sugerowania tematyki badań, dyskusji wyników, redakcji manuskryptów i proponowaniu tematyki dalszych prac. Współautorem pięciu publikacji H1-H3, H5, H6 jest wybitny badacz z Kwansai Gakuin

University w Japonii Prof. Yukihiro Ozaki, Doctor Honoris Causa Uniwersytetu Jagiellońskiego i Uniwersytetu Wrocławskiego, który deklaruje swój współudział w powstawaniu wymienionych prac w formie: krytycznej dyskusji wyników eksperymentalnych i teoretycznych, edytowania manuskryptów oraz projektowaniu nowej tematyki badawczej. Kandydat szacuje swój udział w dziesięciu pracach habilitacyjnych na: H2 - 33%; H1, H5, H6 - 51%; H7 - 55%; H3, H4, H8-H10 - 60%, co daje średnią indywidualnego udziału 48,6%. Habilitant precyzuje też co osobiście wniósł do badań opisanych w każdej z nich, a dominującym wkładem jest zaplanowanie tematyki badań i wykonanie wszystkich lub części obliczeń kwantowo-chemicznych. W załączonych do wniosku oświadczeniach współautorzy precyzyjnie zdefiniowali, co każdy z nich wniósł do publikacji H1-H10. Pomimo braku prac mono-autorskich, udział dr. Breli w powstawaniu publikacji zbiorowych na poziomie 48,6% uznaję za wystarczające uzasadnienie opinii, że publikacje prezentowane jako podstawa habilitacji zawierają w istotnej części rezultaty będące dziełem Kandydata. Konkludując, uważam, że 10 publikacji przedstawionych jako osiągnięcie naukowe powstało przy znaczącym, koncepcyjnym, merytorycznym i twórczym udziale dr. Breli.

2.4 Inne formy aktywności w upowszechnianiu badań

Poza rozdziałem w *Frontiers of Quantum Chemistry* (2018) wchodzącym w skład pakietu habilitacyjnego (H10), Kandydat jest współautorem rozdziału „Dynamic and Static Quantum Mechanical Studies of Vibrational Spectra of Hydrogen-Bonded Crystals” w książce *Molecular Spectroscopy: A Quantum Chemistry Approach*, Wiley-VCH, Weinheim 2019. Ponadto, Habilitant partycypuje w dwóch, międzynarodowych zgłoszeniach patentowych (KR 10-2015-0055518 i US20160308229) dotyczących syntezy polimerów tetrazolowych i ich zastosowania jako komponentu membran ogni w paliwowych. Dr. Brela wygłosił na zaproszenie organizatorów 2 wykłady (zagraniczny i krajowy), 7 komunikatów na konferencjach krajowych i przedstawił 19 posterów (7 na konferencjach międzynarodowych), z których 3 zostały nagrodzone.

Podsumowując, w zakresie punktu 2., Kandydat spełnia wymogi Uchwały 87/XI/2019 Senatu UJ (Załącznik nr 1) dotyczącej osób ubiegających się o tytuł doktora habilitowanego.

3. Ocena osiągnięcia naukowego Kandydata (cykl 10 publikacji), będącego podstawą ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Artykuły H1-H10, wchodzące w skład pakietu habilitacyjnego, dotyczą kwantowo-chemicznych badań dynamiki ruchu protonu w mostkach wodorowych w wybranych kryształach, polimerach i związkach o znaczeniu biologicznym. W tym celu zastosowano znaną metodę BOMD (Born-Oppenheimer Molecular Dynamics), której ideą jest wykorzystanie mechaniki klasycznej do opisu ewolucji czasowej współrzędnych i pędów jąder, z jednoczesnym obliczaniem struktury elektronowej za pomocą metod mechaniki kwantowej, w ramach przybliżenia Borna-Oppenheimera. Strukturę elektronową dla danej konfiguracji jąder wyznacza się zwykle stosując metodę funkcjonału gęstości DFT. Dodatkowo, w obliczeniach Habilitanta zastosowano podejście ST (Snapshots Technique) zaproponowane przez Prof. Janez Marvi i współpracowników (*J. Phys. Chem.* 2008, 112, 1576), u którego dr. Brela odbył trzy krótkoterminowe staże naukowe w latach 2016, 2018 i 2019. Pod względem metodologicznym prace H1-H10 nie wnoszą nic nowego w obszar badań układów z wiązaniem wodorowym, co najwyżej potwierdzają użyteczność w tym względzie metody BOMD wzbogaconej o ST. Natomiast wartość prac H1-H10 wynika z faktu podjęcia badań nad istotnymi komponentami (adenina, cytozyna, guanina, tymina, uracyl) złożonych układów biologicznych, takich jak kwasy nukleinowe, związków o znaczeniu leczniczym (kwas

acetylosalicylowy, tropolon) i technologicznym (α,γ -Nylon-6, PHB), które tworzą kryształy, polimery i specyficzne geometrie (helisa DNA) z wykorzystaniem wiązania wodorowego. W szczególności w pracy **H1** zbadano charakterystykę wiązania wodorowego w dwóch formach krystalicznych aspiryny z uwzględnieniem ruchów termicznych jąder atomowych. Wykazano istnienie średnio-silnych wiązań wodorowych w formie I w porównaniu ze słabszymi wiązaniami w formie II aspiryny. Teoretycznie zreprodukowane widmo IR drgania rozciągającego grupy -OH w cyklicznych dimerach było zgodne z wynikami pomiarów eksperymentalnych. **H2** przedstawia wyniki badań nad reprodukcją widma IR krystalicznej formy kwasu benzoowego oraz jej deuterowanej i częściowo deuterowanej pochodnej. Przy zastosowaniu najprostszego modelu drgań normalnych odtworzono poprawnie kontur widma generowanego przez oryginalne i deuterowane wiązanie wodorowe. W pracy **H3** zbadano polimer kwasu 3-hydroksymasłowego (PHB) o dużym znaczeniu technologicznym i ekologicznym, jako materiał biodegradowalny. Wykazano, że jego struktura oraz aktywność spektralna w zakresie IR zależą od słabego wiązania wodorowego -CH...O=C-. W publikacji **H4** analizowano właściwości uracylu (komponent RNA) i jego metylowych oraz tio-metylowych pochodnych w fazie krystalicznej. Otrzymane wyniki wykazały znaczące różnice między siłą wiązania wodorowego w krystalicznym uracylu, a jego pochodnymi - 1-metylouracylem oraz 1-metylo-4-tiouracylem, które tworzą w fazie krystalicznej dimery, natomiast uracyl ich nie generuje. **H5** prezentuje wyniki badań nad strukturą dwóch form α i γ polimeru Nylon-6 w powiązaniu z dynamiką drgań wiązania wodorowego pomiędzy monomerami. Wykazano, że forma α ma dłuższe wiązanie O...H, niż forma γ . Zreprodukowano również z dużą dokładnością eksperymentalne widmo IR generowane przez drganie rozciągające wiązania N-H, natomiast modelowane widmo drgania C-H różniło się znacznie od eksperymentalnego. W **H6** przedstawiono wyniki badań nad tropolonem - aromatycznym związkiem niebenzenowym, który jest intensywnie badany za pomocą spektroskopii IR i Ramana, w celu wyjaśnienia m.in. zjawiska tunelowania protonów oraz jego aktywności przeciwnowotworowej (J Inorg Biochem 2020, 204110975). W szczególności wykazano istnienie sprzężonego układu drgań rozciągających wiązań wodorowych O-H krystalicznego tropolonu, którego elementem strukturalnym jest pseudo-cykliczny dimer bazowego związku. W **H7** zbadano wpływ wiązania wodorowego na krystaliczną formę guaniny i cytozyny – elementów strukturalnych DNA. Wyniki wykazały znaczną różnicę między siłą wiązania wodorowego generowanego w obu związkach przez grupę -NH. Analiza teoretycznie odtworzonego widma IR faz krystalicznych guaniny i cytozyny ujawniła, że ostatni związek charakteryzuje słabsza sieć wiązań wodorowych w porównaniu z pierwszym. Praca **H8** dotyczy teoretycznego opisu dekompozycji enzymatycznej benzyloaminy, katalizowanej przez MAO-A oraz wpływu na kinetykę reakcji podstawienia izotopowego. Obliczony kinetyczny efekt izotopowy H/D wynoszący $6,5 \pm 1,4$ jest zgodny z wartością eksperymentalną. Praca ta stanowi istotny przyczynek do poznania mechanizmu bio-aktywności leków deuterowanych oraz poprawy ich stabilności umożliwiającej aplikację w warunkach klinicznych. Publikacja **H9** przedstawia wyniki badań porównawczych struktury kryształów adeniny i tyminy w oparciu o dynamikę wiązań wodorowych. Ujawniły one, że w kryształach adeniny oddziaływania międzycząsteczkowe są trójkierunkowe i fluktuują, natomiast w kryształach tyminy są dwukierunkowe, słabe ale stabilne. Efekty te wpływają na obserwowaną różnicę temperatur topnienia adeniny i tyminy. **H10** jest rozdziałem w książce *Frontiers of Quantum Chemistry*, (Springer Nature, 2018), prezentującym najważniejsze metody obliczeniowe stosowane przez Kandydata. Poza wzmiankowanymi metodami CPMD i jej uogólnieniem BOMD, opisane zostały również PIMD (Path Integral Molecular Dynamics), hybrydowa dynamika molekularna (QM/MM) oraz inne metody, które wykorzystują trajektorie MD w symulacji widm IR generowanych przez wiązanie wodorowe. Podejście to umożliwia badania skomplikowanych struktur dimerów obserwowanych w fazie gazowej, oddziaływań sieciowych w kryształach

oraz – perspektywicznie - w roztworach, co jest najbardziej złożonym problemem ze względu na uwarunkowania fizyczne (dyfuzja) i chemiczne (stężenia). Reasumując, uznaję że przedstawiony cykl publikacji H1-H10 Kandydata spełnia wymagania stawiane pracom habilitacyjnym i może być uważany za osiągnięcie naukowe w rozumieniu Ustawy.

Stwierdzam zatem, że osiągnięcie naukowe dr. Mateusza Breli, o którym mowa w § 17 pkt 2, załącznika nr 1 do uchwały 87/IX/2019 Senatu UJ, wnosi istotny wkład do rozwoju dyscypliny naukowej nauki chemiczne.

4. Działalność dydaktyczna

Kandydat prowadził na Wydziale Chemii UJ ćwiczenia rachunkowe i konwersatoria z Chemii Fizycznej, laboratorium z Fotochemii Stosowanej i Biospektroskopii, wykłady i seminarium Spectroscopy of Hydrogen – Bonded System oraz ćwiczenia z Matematyki. Był promotorem trzech prac licencjackich, promotorem pomocniczym dwóch prac doktorskich, opiekunem dwóch prac magisterskich i trzech licencjackich aktualnie realizowanych (2021). Ponadto, koordynował realizację dwóch grantów studenckich.

5. Działalność organizacyjna i współpraca krajowa oraz międzynarodowa

Kandydat aktywnie uczestniczy w funkcjonowaniu Wydziału Chemii UJ, jest członkiem Kolegium Elektorów na kadencję 2020-2024, był reprezentantem nauczycieli akademickich w Radzie Wydziału Chemii UJ (2018-2020), członkiem komisji egzaminacyjnej, powołanej do przeprowadzenia egzaminów licencjackich na Wydziale Chemii UJ. Po uzyskaniu stopnia doktora uczestniczył w krótkoterminowych stażach naukowych w dwóch ośrodkach zagranicznych: Kwansei Gakuin University w Japonii (zapraszający – Prof. Yukihiko Ozaki) oraz w National Institute of Chemistry w Słowenii (Prof. Janez Mavri), a zapraszający Profesorowie zostali współautorami, odpowiednio 5. i 1. publikacji z pakietu habilitacyjnego. Przed doktoratem, Kandydat odbył długoterminowe staże w University of Calgary, Canada (Prof. Tom Ziegler), oraz dwa w National Institute of Chemistry w Słowenii (Prof. Janez Mavri). W latach 2012-2020 był wykonawcą 4. krajowych grantów i projektów badawczych oraz kierownikiem kolejnych 6., w tym 2. zagranicznych projektów obliczeniowych COMPENZ (Wielka Brytania) i NEURONEZ (Finlandia). Habilitant współpracuje również z dr. Takahito Nakajama z Centrum Obliczeniowego Riken w Japonii, który jest współautorem 7. publikacji oraz z Prof. Harumi Sato z Uniwersytetu w Kobe, która jest współautorką 2. prac – wszystkie weszły w skład osiągnięcia naukowego. Działalność naukowa Kandydata była uhonorowana nagrodą Fundacji na rzecz Nauki Polskiej (2020) oraz kilkoma mniej znaczącymi wyróżnieniami.

Niniejszym stwierdzam, że całkowity dorobek naukowy, a w szczególności oryginalne publikacje H1-H10 wskazane jako osiągnięcie naukowe oraz pozostałe aspekty działalności Kandydata, spełniają warunki określone w art. 219 Ustawy (Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce, DzU 2021 r. poz. 478 z późn. zm.) i na tej podstawie wnoszę o dopuszczenie Pana dr. Mateusza Breli do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Prof. dr hab. Marcin Molski