



Gdańsk, 25.09.2023

Dr hab. Zbigniew Kaczyński  
Profesor Uniwersytetu Gdańskiego  
Przewodniczący Rady Dyscypliny Nauk Chemiczne  
Uniwersytet Gdański

### **Recenzja osiągnięć naukowych w postępowaniu habilitacyjnym dr Rafała Ślusarza**

Habilitant jest absolwentem Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego, tytuł magistra chemii uzyskał w roku 1999 a w roku 2002 uzyskał stopień doktora nauk chemicznych w zakresie chemii na podstawie rozprawy „Symulowanie dynamiką molekularną blokowania i aktywacji receptorów sprzężonych z białkiem G” przyznany przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. Aktualnie habilitant jest zatrudniony jako adiunkt na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. Wydział ten był miejscem zatrudnienia od ukończenia studiów przez cały okres kariery zawodowej.

Aktualne parametry bibliometryczne działalności naukowej Habilitanta to: IF przed uzyskaniem stopnia doktora: 13,97, po uzyskaniu stopnia doktora: 103,00, sumaryczny: 116,97 (lub 122,61 wg pięcioletniego IF). Liczba cytowań wg Scopus: 611 (581 bez autocytowań). Indeks Hirscha wg Scopus: 15.

### **Ocena osiągnięcia naukowego**

Jako swoje osiągnięcie naukowe stanowiące istotny wkład w rozwój dyscypliny naukowej Habilitant przedstawił cykl 14 prac powiązanych tematycznie pod tytułem: „Zastosowanie nowych metod modelowania małowcząsteczkowych ligandów i ocena ich aktywności w układach biologicznych”. Publikacje te powstały w okresie od roku 2006 do roku 2022. łączna wartość współczynnika IF tych prac wynosi 49.62. W siedmiu pracach Habilitant jest pierwszym autorem, a sześciu również korespondencyjnym. Z załączonych deklaracji współautorów wynika, że we wszystkich tych publikacjach wkład Habilitanta był kluczowy.

Przedmiotem badań habilitanta w przedstawionym osiągnięciu jest modelowania interakcji międzycząsteczkowych, które mogą mieć znaczenie w układach biologicznych. W szczególności badaniom poddano interakcje które mogą pomóc w opracowaniu nowych leków. Badania te są unikalne i stanowią szczególne wyzwanie ze względu na konieczność połączenia kompetencji na najwyższym poziomie w bardzo różnych dyscyplinach takich jak



matematyka, chemia fizyczna, informatyka, biochemia, farmakologia i medycyna. Praca habilitacyjna stanowi niezwykłą podróż od analizy struktury cząsteczek zarówno małych jak i makrocząsteczek poprzez opracowanie algorytmów analizy ich wzajemnej interakcji, tworzenie unikalnego oprogramowania do zastosowania w analizie działania i projektowaniu nowych leków. Badania takie mogą przyczynić się nie tylko do znacznie szybszego rozwoju nowych leków, zastępując konieczność prowadzenia wieloletnich badań tradycyjnymi metodami laboratoryjnymi lecz również, w dalszej perspektywie, mogą umożliwić projektowanie realizujących zdefiniowane funkcje makrocząsteczek.

Cykl publikacji stanowiący osiągnięcie naukowe Habilitanta prezentuje założenia, metody i wnioski wynikające z modelowania oddziaływań międzycząsteczkowych. W swych badaniach Habilitant skupił się na związkach endogennych lub egzogennych, w tym stosowanych jako leki.

Pierwsza część cyklu prac stanowiącego osiągnięcie habilitacyjne koncentruje się na hormonach podwzgórza – antydiuretycznym oraz oksytocynie. Oddziaływanie naturalnie występujących hormonów z ich receptorami było porównane do oddziaływań zmodyfikowanych wersji tych hormonów w celu zwiększenie ich aktywności lub selektywności. W swych badaniach Habilitant analizował wpływ tych modyfikacji na oddziaływanie z receptorem, zawierając sugestie dalszych modyfikacji służących zwiększeniu aktywności.

Druga część cyklu to prace dotyczące antybiotyku wankomycyny. Modelując oddziaływania wankomycyny z peptydoglikanem ściany komórkowej bakterii Habilitant analizował mechanizm tego wiązania, jak i możliwości wykorzystania innych grup funkcyjnych, aby doprowadzić do wzmocnienia oddziaływań. Zaproponowane zostały takie modyfikacje struktury wankomycyny, które mogą prowadzić do przełamania oporności na wankomycynę. Prace tej części habilitacji zawierają również opis preferowanych konformacji trzech antybiotyków: wankomycyny, telawancyny i oritawancyny. Kolejne badania dotyczyły pochodnych nukleozydów o potencjalnym działaniu przeciwgrzybiczym.

Ostatnia z prac cyklu podsumowuje doświadczenie Habilitanta zdobyte podczas wykonywanego wcześniej samodzielnego przygotowywanie modelowanych struktur oraz prowadzenia symulacji z wykorzystaniem gotowych, jak i przygotowanych samodzielnie algorytmów postępowania i narzędzi na potrzeby konkretnych zadań.

Przedstawiony przez Habilitanta cykl prac opisuje spójny zestaw rozwiązań technicznych, metodologicznych i merytorycznych wykorzystujących modelowanie molekularne do



badania oddziaływań i zmienności konformacyjnej drobnocząsteczkowych ligandów występujących w układach biologicznych. Wskazuję w nim, jak można zastosować lub zmodyfikować znane narzędzia i metody, aby w nowatorski sposób zbadać oddziaływania cząstek chemicznych występujących w układach biologicznych.

### **Ocena pozostałej aktywności naukowej oraz działalności dydaktycznej**

Działalność naukowa Habilitanta obejmuje współpracę w wieloma prestiżowymi zespołami badawczymi na świecie, w tym z zespołami Gia Maisuradze, Silvii Crivelli czy Yi He z USA, Jooyoung Lee z Korei czy Jayanty Haldara z Indii, które zaowocowały znaczącymi publikacjami, wspólną organizacją konferencji naukowych oraz rozwojem specjalistycznego oprogramowania służącego modelowaniu interakcji międzycząsteczkowych i przewidywaniu struktury białek. Habilitant od roku 2022 jest konsultantem ogólnopolskiego projektu PIONIER-LAB – Krajowa Platforma Integracji Infrastruktur Badawczych z Ekosystemami Innowacji.

Habilitant uczestniczył i nadal uczestniczy w realizacji kilkunastu projektów badawczych lokalnych, ogólnopolskich i międzynarodowych. Był kierownikiem projektów lokalnych i jednym nadal kieruje. Został wyróżniony jako wykonawca projektu międzynarodowego.

Działalność dydaktyczna obejmuje prowadzenie zajęć z 26 przedmiotów (w tym wykładów i ćwiczeń laboratoryjnych) na wszystkich trzech stopniach edukacji wyższej. Habilitant przygotował i prowadził 4 przedmioty na studiach podyplomowych, 2 kursy zewnętrzne. Jest autorem 3 skryptów do ćwiczeń. Wygłosił 3 wykłady popularnonaukowe oraz serię warsztatów/ćwiczeń laboratoryjnych (z zakresu chemii ogólnej i organicznej) dla młodzieży szkół podstawowych i ponadpodstawowych. Uzyskał 2 certyfikaty rozwoju kompetencji dydaktycznych oraz certyfikat e-nauczyciela. Habilitant wielokrotnie uczestniczył w organizacji Bałtyckiego Festiwalu Nauki, Dni Otwartych Wydziału Chemii UG, pracach Komitetu Organizacyjnego Polish-Korean Conference on Protein Folding. Zaprojektował i administruje portalem internetowym służącym prezentacji i upublicznieniu pakietu obliczeniowego UNRES. Habilitant był członkiem wielu komisji i rad programowych UG.

Habilitant otrzymał wiele nagród, w tym: nagrodę Procter & Gamble dla Najlepszego Absolwenta Uczelni, zespołową Nagrodę Ministra Edukacji i Sportu. Nagrodę Polskiego Towarzystwa Chemicznego za Najlepszą Rozprawę Doktorską z Dziedziny Chemii, wśród rozpraw obronionych w 2004 r. Został wyróżniony w rozliczeniu projektu przez Fogarty International Research Collaboration Award, otrzymał indywidualną i zespołowe nagrody Rektora UG. Jest prezesem Klubu Absolwentów Wydziału Chemii.



## Podsumowanie i wnioski końcowe

Dorobek naukowy Habilitanta jest imponujący. Habilitant jest najwyższej klasy światowym ekspertem w bardzo perspektywnym obszarze działalności naukowej. Ma jasno wyznaczone cele które nie tylko służą teoretycznym aspektom chemii fizycznej, lecz również mają wymierny aspekt praktyczny. Dorobek w działalności organizacyjnej i dydaktycznej dorównuje skali działalności naukowej, również wielokrotnie przekraczając oczekiwania. Wszystko powyższe świadczy o wielkiej pasji Habilitanta we wszystkich tych obszarach i jest gwarancją dalszej efektywnej działalności naukowej, organizacyjnej i dydaktycznej.

Osiągnięcia te z nawiązką spełniają kryteria stawiane osobom ubiegającym się o stopień naukowy doktora habilitowanego (zgodnie z art. 219 Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 r. – Dz. U. z 2021 r. poz 478 z późn. Zm). Wnoszę niniejszym do Komisji Habilitacyjnej o podjęcie uchwały o nadanie dr Rafałowi Ślusarzowi przez Radę Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Gdańskiego stopnia doktora habilitowanego.

Osiągnięcia habilitanta zasługują na wyróżnienie biorąc pod uwagę ogromną skalę wysiłku badawczego oraz znaczenie teoretyczne i praktyczne uzyskanych wyników.

Z poważaniem

**KIEROWNIK**  
Katedry i Zakładu Biochemii  
Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego  
*Ryszard Tomasz Smoleński*  
prof. dr hab. *Ryszard Tomasz Smoleński*