



8 sierpnia 2023 r.

Prof. dr hab. inż. Waclaw Andrzej Sokalski

Instytut Materiałów Zaawansowanych

Politechnika Wroclawska

Wyb. Wyspiańskiego 27

50-370 Wrocław

Ocena osiągnięcia naukowego p.t. „Zastosowania nowych metod modelowania międzycząsteczkowych ligandów i ocena ich aktywności w układach biologicznych” oraz istotnej aktywności naukowej dr Rafała Ślusarza w związku z toczącym się postępowaniem habilitacyjnym

Pan dr Rafał Ślusarz ukończył w roku 1999 studia wyższe na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego, a następnie w roku 2004 obronił na tym samym Wydziale rozprawę doktorską pt. „Symulowanie dynamiką molekularną blokowania i aktywacji receptorów sprzężonych z białkiem G” pracując pod kierunkiem prof. dr hab. Jerzego Ciarkowskiego. W latach 2001-2003 pracował w charakterze starszego technika, a następnie w okresie 2003-2004 asystenta, następnie w latach 2004-2006 administratora lokalnej sieci komputerowej i od 2006 r. adiunkta na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego.



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wroclawska
Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614
NIP: 896-000-58-51
Bank Zachodni WBK S.A.
37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Ocena osiągnięcia naukowego

Przejdę teraz do oceny osiągnięcia naukowego dr Rafała Ślusarza opartego na 14 publikacjach w renomowanych czasopismach międzynarodowych wchodzących w skład tzw. listy filadelfijskiej. Cykl publikacji jest spójny tematycznie i ogólnie dotyczy wielkoskalowego modelowania oddziaływań małowcząsteczkowych ligandów z receptorami białkowymi, głównie metodą dynamiki molekularnej, dostarczając informacji niedostępnych doświadczalnie lub je istotnie uzupełniając i wyjaśniając ich funkcję.

Istotną grupę zagadnień podjętych przez dr Rafała Ślusarza stanowi badanie oddziaływań zmodyfikowanych antybiotyków wankomycyny, telawancyny i oritawancyny oraz hormonów argininowej wazopresyny i oksytocyny z białkami.

Innym ważnym obszarem aktywności dr Ślusarza było opracowanie modeli bakteryjnych ścian komórkowych.

Na kluczową rolę dr Rafała Ślusarza w badaniach naukowych opisanych w tych pracach mogą wskazywać jego własne oświadczenia potwierdzone przez współautorów. W sześciu pracach H05-H06, H08-H10 oraz H13 dr Ślusarz był autorem korespondencyjnym. Ze względu na zespołowy i interdyscyplinarny charakter tych prac, w których zaangażowani byli również eksperymetatorzy, wydaje się to zrozumiałe.

Do najważniejszych osiągnięć naukowych uzyskanych przez dr Rafała Ślusarza można zaliczyć:



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wroclawska

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Bank Zachodni WBK S.A.

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



- a) Uzyskanie pierwszych pełnoatomowych trójwymiarowych modeli receptorów argininowej wazopresyny i oksytocyny. Umożliwiło to racjonalne zaprojektowanie modyfikacji analogów wyżej wspomnianych hormonów.
- b) Opracowanie modelu molekularnego bakteryjnej ściany komórkowej w postaci pełnoatomowej struktury peptydoglikanu.
- c) Wyjaśnienie różnic pomiędzy aktywności wankomycyny, oritawancyny i telawancyny.
- d) Odkrycie oddziaływań C-końca wankomycyny z pentapeptydem wchodzącym z w skład ściany komórkowej bakterii Gram-dodatnich potwierdzone doświadczalnie.

W większości prac wchodzących w skład wniosku, dr Rafał Ślusarz był jedynym, bądź najstarszym stażem teoretykiem odpowiedzialnym za opracowanie koncepcji obliczeń, konstrukcję modeli molekularnych oraz analizę wyników obliczeń.

Co jest szczególnie warte podkreślenia twórczy wkład dr Rafała Ślusarza polegał także na rozwoju metodologii badań polegający na opracowaniu nowych złożonych algorytmów wykorzystujących wiele zróżnicowanych technik modelowania molekularnego umożliwiających głębsze zrozumienie mechanizmów działania badanych ligandów.

Świadczy to o tym, że dr Ślusarz dysponuje doświadczeniem





oraz warsztatem badawczym pozwalającym na samodzielne rozwiązywanie złożonych problemów z zakresu modelowania molekularnego procesów zachodzących w układach białkowych.

Ocena istotnej aktywności naukowej

Dr Rafał Ślusarz opublikował łącznie 48 oryginalnych prac, z czego 39 pozycji po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych. Ze wspomnianych 39 prac, większość opublikowano w czasopismach z listy filadelfijskiej, w tym w tak renomowanych czasopismach międzynarodowych jak: Proceedings of the National Academy of Sciences US, Journal of Molecular Graphics and Modelling, Bioinformatics, Journal of Computer-Aided Molecular Design, Journal of Medicinal Chemistry, Biopolymers, European Journal of Medicinal Chemistry, Journal of Molecular Modeling, Journal of Carbohydrate Chemistry,

Sumaryczny czynnik oddziaływania czasopism w których były publikowane prace dr Rafała Ślusarza wynosi 116;97 (w tym prace opublikowane po doktoracie 103.00), a współczynnik Hirscha 14. Do sierpnia 2023 roku publikacje dr Ślusarza były cytowane przez innych autorów 425 razy (bez autocytowań), prawie czterokrotnie częściej niż wskazywałyby na to wymieniony wyżej statystyczny współczynnik oddziaływania. Może to świadczyć o tym, że nie są to prace przyczynkarskie, lecz dotyczą ważnych i aktualnych zagadnień.

Do osiągnięć naukowych dr Ślusarza należy dodać wygłoszenie zaproszonego wykładu na konferencji międzynarodowej w Izraelu oraz przedstawienie 66 prezentacji w charakterze głównego autora i 13



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wroclawska

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Bank Zachodni WBK S.A.

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



jako współautora, głównie na konferencjach krajowych. Prawdopodobnie było to konsekwencją braku własnych grantów badawczych.

Jak wskazują informacje podane w publikacjach dr Ślusarza, kierował on 6 wewnętrznymi grantami Uniwersytetu Gdańskiego, natomiast w 9 grantach KBN, NIH FIRCA, POIG oraz grantów NCN był wykonawcą. W tym zakresie dorobek należy jednak uznać za skromny, jak dla osoby aspirującej do samodzielnej pozycji naukowej. Bez wątpienia Habilitant powinien w przyszłości wykazać więcej inicjatywy w zakresie pozyskiwania środków na finansowanie własnych badań, koncentrując się na doskonaleniu i rozwoju nowych metod obliczeniowych, co zwykle jest podstawą samodzielnych wniosków grantowych teoretyków.

Dr Artur Ślusarz współpracuje z zagranicznymi zespołami badawczymi, m.in. z renomowanego Cornell University oraz University of California w Davis w USA oraz Korean Institute for Advanced Study czego efektem było dotąd 8 publikacji.

Doświadczenie Kandydata w pracy dydaktycznej jest bardzo bogate obejmujące prowadzenie 15 rodzajów wykładów, 22 typów laboratoriów z takich przedmiotów jak: technologia informacyjna, chemia teoretyczna oraz 17 autorskich kursów takich jak „Wstęp do grafiki molekularnej”, „Grafika molekularna”, „Technologia informacyjna w chemii”, „Administracja systemami operacyjnymi”, „Systemy operacyjne”.

W zakresie działalności popularyzatorskiej dr Ślusarz wykazywał dużą aktywność prowadząc m.in. warsztaty popularno-naukowe dla młodzieży szkół podstawowych i średnich, dni otwartych na Wydziale



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

Politechnika Wroclawska

Wybrzeże Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

www.pwr.edu.pl

REGON: 000001614

NIP: 896-000-58-51

Bank Zachodni WBK S.A.

37 1090 2402 0000 0006 1000 0434



Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. Ponadto 7-krotnie uczestniczył w organizacji Bałtyckiego Festiwalu Nauki oraz 4-krotnie w organizacji polsko-koreańskiej konferencji „Protein Folding”.

W podsumowaniu pragnę stwierdzić, że opisane badania naukowe w cyklu 14 prac spełniają kryterium nowości naukowej wymaganej w procedurze habilitacyjnej. Całkowity dorobek naukowy dr Rafała Ślusarza na który składa się 50 publikacji oraz 66 prezentacji konferencyjnych uważam za znaczący. Działalność naukowa Kandydata znajdowała uznanie wyrażone zespołową nagrodą Ministra w 2003 r., Proctor & Gamble w 1999 r., PTCh w 2005 r. oraz zespołowe nagrody Rektora UG w 2020 i 2022 r.

Warto dodać, że szereg innych prac Autora, nie wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej, zawiera również bardzo ciekawe i wartościowe wyniki, o czym może świadczyć liczba 335 cytowań tych prac. Interesujące mogą być dalsze plany badawcze Kandydata w zakresie modelowania cieczy jonowych oraz materiałów porowatych. Warto jednak zaznaczyć, że wobec obserwowanego ostatnio dramatycznego rozwoju metod opartych na uczeniu maszynowym wiele tradycyjnych metod modelowania molekularnego może być zastąpione nowymi technikami.

Reasumując stwierdzam, że dr Rafał Ślusarz posiada wymagany dorobek naukowy oraz wykazuje aktywność spełniającą podstawowe warunki stawiane habilitantom, zgodnie z ustawą z dnia 20 lipca 2018 roku, Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. 2018, poz. 1668 z późniejszymi zmianami). Wobec tego stawiam wniosek o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



HR EXCELLENCE IN RESEARCH