



UNIwersytet
Opolski

WYDZIAŁ CHEMII i FARMACJI

ul. Oleska 48, 45-052, Opole
tel. 77 452 71 00
fax 77 452 71 01
www.wch.uni.opole.pl

prof. dr hab. Jacek Lipok

E-mail: jacek.lipok@uni.opole.pl

Opole 14 maja 2024

Ocena

osiągnięć Pani doktor Emilii Lubeckiej

**w związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne**

Niniejszą ocenę przeprowadziłem na podstawie uchwały nr 26/RD/24 Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Gdańskiego z dnia 13 marca 2024 roku, o powołaniu mnie jako recenzenta w postępowaniu dotyczącym nadania stopnia doktora habilitowanego Pani dr Emilii Lubeckiej. Ocena została przygotowana w oparciu o dostarczoną dokumentację, w skład której wchodzi: wniosek Habilitantki, kopia dyplomu doktorskiego, zestaw podstawowych danych umożliwiających kontakt z Wnioskodawczynią, autoreferat, wykaz osiągnięć naukowych oraz kopie prac tworzących osiągnięcie naukowe Habilitantki, wraz ze stosownymi oświadczeniami współautorów. Wymagane dokumenty zostały złożone w języku polskim oraz w języku angielskim.

Sylwetka Habilitantki

Pani dr Emilia Lubecka ukończyła studia magisterskie na kierunku Ochrona Środowiska, na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego w 2008 roku, uzyskując tytuł zawodowy magistra na podstawie pracy dyplomowej pod tytułem "Określenie wybranych elementów struktury pierwszorzędowej antygeny somatycznego bakterii Salmonella Telaviv", zrealizowanej pod kierunkiem ówczesnej Pani dr Jolanty Kumirskiej. Po studiach magisterskich, Kandydatka rozpoczęła Studia Doktoranckie Chemii i Biochemii przy Wydziale Chemii UG, pod kierunkiem prof. dra hab. Jerzego Ciarkowskiego. Zajęła się wtedy analizą strukturalną krótkich peptydów - analogów hormonów neuroprzysadkowych - oraz 276-aminokwasowego białka - drugiej cysteinowej pół-domeny katalitycznej enzymu E1 aktywującego ubikwitynę myszy. W toku prac wykorzystywała symulacje w pełnoatomowym polu siłowym AMBER oraz różne techniki spektroskopii NMR. Jakość tych działań sprawiła, że w 2011 roku z sukcesem aplikowała o grant NCN PRELUDIUM1 pt. "Analiza konformacyjna wybranych analogów hormonów neuroprzysadkowych w środowisku imitującym błony biologiczne", który realizowała w latach 2011 - 2014. W międzyczasie, w marcu 2013 roku obroniła pracę inżynierską pt.: "Program Sparky: analiza wizualizacji informacji oraz rozszerzenie funkcjonalności o nową metodę przypisywania sygnałów NMR alifatycznych łańcuchów bocznych peptydów i białek", na Wydziale Elektroniki, Telekomunikacji i Informatyki Politechniki Gdańskiej. Ukoronowaniem Jej aktywności naukowej i edukacyjnej w tamtym

okresie była obrona pracy doktorskiej pt : „1D-4D NMR w analizie struktury i konformacji biomolekuł: od analogów wazopresyny do drugiej cysteinowej pół-domeny katalitycznej enzymu E1 aktywującego ubikwitynę” i uzyskanie stopnia doktora nauk chemicznych w zakresie chemii, nadanego przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego w dniu 9 kwietnia 2014 roku.

Po obronie doktoratu, Pani dr Emilia Lubecka rozpoczęła pracę jako specjalista analityk w projekcie PI-Grid NG w Centrum Informatycznym Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej (CI TASK) na Politechnice Gdańskiej. Na tym stanowisku pracowała do października 2015, by z dniem 01.10.2015 rozpocząć pracę jako adiunkt naukowo-dydaktyczny w Instytucie Informatyki, Wydziału Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego. Z początkiem października 2020 roku Habilitantka zmieniła miejsce pracy na Wydział Elektroniki, Telekomunikacji i Informatyki Politechniki Gdańskiej, gdzie pracuje do dnia dzisiejszego na stanowisku adiunkta badawczo-dydaktycznego. Warto nadmienić, że od października 2022 roku do maja 2023 roku Pani dr Emilia Lubecka była również zatrudniona jako post-doc w projekcie PathoGelTrap (Horizont 2020, Nr 899616) w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie.

Ocena osiągnięcia naukowego

Przedstawione do oceny osiągnięcie naukowe Pani dr Emilii Lubeckiej zatytułowane: **”Opracowanie nowych metod w modelowaniu struktury i oddziaływań biomolekuł na różnych poziomach rozdzielczości”**, stanowi cykl 12 powiązanych tematycznie oryginalnych prac naukowych, opublikowanych w latach 2015-2023. Dziesięć (10) spośród wspomnianych prac zostało opublikowanych w opiniotwórczych czasopismach z listy JCR, o czym świadczy średnia wartość współczynnika oddziaływania IF, wynosząca ponad 3,1 na pracę oraz fakt, że prezentowane treści znalazły już pewien oddźwięk w środowisku, czego dowodzi liczba około 20 niezależnych cytowań tych publikacji oraz łączna liczba blisko 60 odniesień ogółem (*Scopus*;10.05.2024). Dwie prace wchodzące w skład osiągnięcia (H3 i H5) zostały ulokowane w specjalistycznych czasopismach wydawanych w języku angielskim, które znajdują się w aktualnym wykazie czasopism naukowych MNiSW. Warto zauważyć, że Habilitantka jest pierwszym autorem w 9 pracach podanych w omawianym cyklu, a w 8 jest autorem korespondencyjnym, co wskazuje na Jej wiodący udział, potwierdzony stosownymi oświadczeniami.

Problematyka naukowa ocenianego osiągnięcia Pani dr Emilii Lubeckiej dotyczy rozwoju metod obliczeniowych pozwalających na analizę układów biomolekuł, przede wszystkim peptydów i białek. Warto podkreślić, że wspomniane osiągnięcie jest logiczną konsekwencją rozwoju zainteresowań naukowych Habilitantki, zainicjowanych już na etapie pracy dyplomowej, pogłębianych w toku badań zwieńczonych obroną pracy doktorskiej i twórczo eksplorowanych w trakcie niespełna dekady poprzedzającej złożenie niniejszego wniosku. Klarowna jest również ogólna koncepcja badawcza zakładająca dobór i modyfikację metod obliczeniowych, których zastosowanie umożliwi analizowanie układów wieloatomowych oraz przeprowadzanie złożonych symulacji w rozsądnym czasie. Należy zwrócić uwagę, że w przypadku kiedy było to możliwe i korzystne dla rozwiązania problemu naukowego, Kandydatka znakomicie wykorzystwała swoje kompetencje dotyczące zastosowania różnych technik spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego, rozszerzając funkcjonalność programów obliczeniowych w oparciu o dane uzyskane w eksperymentach NMR. W ten sposób Pani dr

Lubecka świadoma ograniczeń związanych z zastosowaniem pól pełnoatomowych pozwalających na analizę struktur relatywnie niewielkich molekuł, skoncentrowała się na rozwijaniu i rozszerzeniu zastosowań gruboziarnistego pola siłowego UNICORN. Pakiet UNICORN, w skład którego wchodzi pole siłowe UNRES (do modelowania białek), NARES-2P (dla kwasów nukleinowych) oraz SUGRES-1P (dla cukrów), został z powodzeniem wykorzystany przez Habilitantkę do analizy zjawisk towarzyszących zmianom strukturalnym peptydów i białek, w tym tworzeniu oligomerów, powstawaniu włókien peptydów amyloidogennych oraz związaniu się białek. W tej sferze działań Kandydatki wyróżnić można trzy komplementarne nurty badawcze zwieńczone stosownymi publikacjami potwierdzającymi Jej wiodący udział. Pierwszy obszar to optymalizacja wykorzystania więzów pochodzących z kontaktów międzyresztowych oraz wprowadzenie więzów na odległości z danych NMR do pola siłowego UNRES. Kolejny obszar uwzględniał oddziaływania białek z kwasami nukleinowymi, w szczególności optymalizację wag oddziaływań białko - kwas nukleinowy w polu siłowym NARES-2P, zweryfikowaną w oparciu o wykorzystanie tych wag do symulacji oddziaływań białka prionowego z RNA. W tym samym obszarze Kandydatka ujęła wyznaczenie nowych potencjałów lokalnych dla łańcuchów heparyny i poliglukozy, zastosowanych w polu siłowym SUGRES-1. Trzeci nurt badawczy związany był z optymalizacją algorytmów i kodu pola siłowego UNRES w celu umożliwienia prowadzenia dłuższych symulacji oraz analizy większych układów molekularnych. Należy podkreślić konkretne efekty wspomnianych działań; przede wszystkim poprawę jakości uzyskiwanych struktur, możliwość wykorzystania zbiorów danych zawierających błędne i/lub niejednoznaczne więzy oraz rozszerzenie zakresu stosowania opracowanych metod. Istotne wydaje się również to, że wszystkie modyfikacje algorytmów i kodu wprowadzone przez Habilitantkę zostały przetestowane dla różnych układów biologicznych i co szczególnie godne podkreślenia - udostępnione innym badaczom na stronie www.unres.pl.

Odnosząc się do „technikaliów”, nie zgłębiając przy tym intencji Kandydatki i zwyczajów panujących w Jej macierzystej jednostce naukowej, chciałbym jedynie zwrócić uwagę na nieco zaskakujące przypisanie procentowego udziału autorskiego w pracach opublikowanych wspólnie z prof. Adamem Liwo. Aż 95% udziału przypisanego Habilitantce może budzić niepotrzebne kontrowersje, tym bardziej, że oboje Autorzy określili zadaniowo zakres swojego zaangażowania.

Podsumowując ocenę niniejszego osiągnięcia chciałbym stwierdzić, że odzwierciedla ono aktywność badawczą Pani dr Emilii Lubeckiej i dotyczy atrakcyjnej tematyki naukowej, której znaczenie będzie rosło ze względu na dynamiczny rozwój metod obliczeniowych i skok jakościowy związany z perspektywnym wprowadzeniem komputerów kwantowych do zastosowania tych metod.

Ocena aktywności naukowej Pani dr Emilii Lubeckiej

Analizując aktywność naukową Habilitantki zauważam, że wynika ona z przebiegu kariery zawodowej cechującej badacza młodszego pokolenia ubiegających się o stopień doktora habilitowanego. Istotnymi i pożądanymi elementami realizowania aspiracji zawodowych w ten sposób są: zmiana pracodawcy – funkcjonowanie w więcej niż jednej instytucji naukowej, staże zagraniczne, współpraca z badaczami wywodzącymi się z różnych szkół naukowych, interdyscyplinarność, uczestniczenie w projektach badawczych finansowanych w trybie konkursowym. W przebiegu dotychczasowej kariery naukowej Pani dr Emilii Lubeckiej odnajduję wszystkie wymienione wcześniej elementy. Formalnymi rezultatami

tej aktywności w sferze publikacyjnej jest łącznie 31 artykułów naukowych. Poza artykułami ulokowanymi w czasopismach naukowych, Habilitantka może poszczycić się współautorstwem trzech rozdziałów w książkach anglojęzycznych wydanych przez uznanych wydawców (Humana Press New York,, Springer Nature Switzerland, Academic Press, London). Zatem od momentu uzyskania stopnia doktora w roku 2014, Kandydatka jest współautorką bądź autorką dwudziestu pięciu (25) prac wykazanych w bazie Scopus. W tej liczbie mieszczą się dwa rozdziały w monografii oraz errata.

Odnosząc się do pełnych danych naukometrycznych Habilitantki można stwierdzić, że łączna wartość współczynnika oddziaływania IF 22 publikacji, które ukazały się w czasopismach z listy JCR od 2015 roku, wynosi około 66. Liczba niezależnych cytowań Jej prac wynosi niemal 120, a łączna liczba odniesień do prac, których jest współautorką zbliża się do 320. Tak zwany indeks Hirsha wydaje się odpowiadać tym danym, gdyż wynosi 10 (*Scopus*; 10.05.2024), co koreluje z łączną liczbą niezależnych odniesień do Jej dorobku wynoszącą blisko 180. Obrazu naukowego zaangażowania dr Emilii Lubeckiej dopełniają: kierowanie przez Nią projektem badawczym NCN PRELUDIUM1 (2011/01/N/ST4/05175) pt.: "Analiza konformacyjna wybranych analogów hormonów neuroprzysadkowych w środowisku imitującym błony biologiczne" oraz dwoma projektami badawczymi przyznanymi przez Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego (2017; 2019). Habilitantka kierowała również 7 grantami obliczeniowymi w infrastrukturze PLGrid, w ramach których przyznano łącznie ponad 39 000 000 godzin zasobów obliczeniowych. Jest również współautorką wdrożenia usługi UNRES do modelowania gruboziarnistego białek w ramach projektu PL-GRID-ng. Po doktoracie, Habilitantka była lub jest wykonawczynią w 5 projektach finansowanych ze środków zewnętrznych (NCN, EU). Uznanie budzi także udział Kandydatki w stażach po doktoracie, w tym jeden zagraniczny - 3 miesięczny na zaproszenie (Wydział Chemii i Biochemii Uniwersytetu Oklahomy; Norman, OK, USA; 2019) i 8 miesięczny staż post-doc w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie (10.2022 - 05.2023). Docenić należy również efektywną współpracę międzynarodową i aktywny udział Pani dr Lubeckiej w 43 (w tym 32 międzynarodowych) konferencjach naukowych (29 po doktoracie), szczególnie zaś wykład na zaproszenie, który wygłosiła w trakcie *4th International Conference on Mathematical & Computational Medicine*, w Riviera Cancun, Meksyk, w 2018 roku.

Ocena aktywności dydaktycznej i organizacyjnej

Informacje dotyczące zaangażowania Pani dr Emilii Lubeckiej w działalność dydaktyczną wskazują, że również w tej sferze aktywności posiada pewne osiągnięcia. Uznanie budzą przygotowane przez Nią autorskie programy (wykład + ćwiczenia) 5 kursów prowadzonych na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego (lata 2015-2020) oraz 3 kursów prowadzonych na Wydziale Elektroniki, Telekomunikacji i Informatyki Politechniki Gdańskiej (lata 2020-2023). Warto dodać, że dwa z tych kursów prowadzone są w języku angielskim. Do tej pory Habilitantka sprawowała opiekę nad 15 pracami licencjackimi, a obecnie pełni rolę promotora dwóch prac magisterskich.

Umiejętności organizacyjne Pani dr Lubeckiej zostały docenione przez władze Wydziału, co znalazło wyraz w powierzeniu Jej funkcji opiekuna roku na kierunku Informatyka (studia licencjackie i magisterskie) w latach 2015-2020 w Instytucie Informatyki UG oraz funkcji członka Komisji

Rekrutacyjnej Wydziału Matematyki, Fizyki i Informatyki UG na kierunek Informatyka (I i II stopień studiów stacjonarnych i niestacjonarnych), w roku akademickim 2017/2018.

W świetle przedstawionych informacji, Habilitantka jest zaangażowana przede wszystkim w działalność naukową, a w pewnym stopniu także w dydaktykę i sprawy organizacyjne swojej Uczelni i Wydziału.

Podsumowanie

Analiza dokumentacji dotyczącej postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego, które zostało wszczęte na wniosek dr Emilii Lubeckiej oraz informacje pochodzące z elektronicznych baz wiedzy, pozwalają mi na stwierdzenie, że tematyka badań podejmowanych przez Habilitantkę jest osadzona w jednym z ważnych nurtów współczesnej chemii – predykcji właściwości związków chemicznych w oparciu o adekwatne modele teoretyczne.

Uważam też, że dziewięcioletni okres czasu, który upłynął od uzyskania stopnia doktora do momentu rozpoczęcia procedury habilitacyjnej, został wykorzystany przez Kandydatkę efektywnie, na co wskazują Jej osiągnięcia i rosnąca niezależność w prowadzeniu badań naukowych, a także aktywność dydaktyczna. Uważam zatem, iż z punktu widzenia ustawowych i zwyczajowych wymagań postępowania habilitacyjnego, wniosek Pani dr Emilii Lubeckiej jest zasadny i spełnia kryteria akceptowane w dziedzinie i w dyscyplinie naukowej, w której ubiega się Ona o nadanie stopnia doktora habilitowanego, spełniając tym samym wymagania określone w ustawie z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478 zm.), z późniejszymi zmianami.

Zaangażowanie Pani dr Emilii Lubeckiej w sfery aktywności zawodowej cechujące pracowników badawczo-dydaktycznych uczelni, szczególnie Jej osiągnięcia oraz postępująca autonomia w działalności naukowej sprawiają, że postanowiłem pozytywnie zaopiniować i poprzeć Jej wniosek o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.