



UNIwersytet  
Warszawski

CeNT CENTRUM  
NOWYCH  
TECHNOLOGII

29 kwietnia, 2024

Prof. dr hab. Joanna Trylska  
e-mail: [joanna@cent.uw.edu.pl](mailto:joanna@cent.uw.edu.pl)  
telefon (22) 55 43 600  
<http://bionano.cent.uw.edu.pl>

Przewodniczący Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne  
Dr hab. Zbigniew Kaczyński, prof. UG  
Uniwersytet Gdański  
Ul. Wita Stwosza 63  
80-308 Gdańsk

**Recenzja w postępowaniu w sprawie nadania dr inż. Emilii Lubeckiej stopnia doktora  
habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne**

**Informacje podstawowe i sylwetka habilitantki**

Przedstawiono mi do oceny osiągnięcie naukowe dr inż. Emilii Lubeckiej. Z otrzymanej przeze mnie dokumentacji wynika, że pani Emilia Lubecka uzyskała stopień doktora na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego w roku 2014, pod kierunkiem profesora Jerzego Ciarkowskiego. Po doktoracie pracowała przez ponad rok jako specjalista analityk w Centrum Informatycznym Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej na Politechnice Gdańskiej. W latach 2015-2020 pracowała jako adiunkt naukowo-dydaktyczny w Instytucie Informatyki, na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego. Od roku 2020 pracuje jako adiunkt badawczo-dydaktyczny na Wydziale Elektroniki, Telekomunikacji i Informatyki Politechniki Gdańskiej.

**Ocena osiągnięcia naukowego przedstawionego w formie cyklu publikacji**

Habilitantka przedstawiła osiągnięcie naukowe zatytułowane „Opracowanie nowych metod w modelowaniu struktury i oddziaływań biomolekuł na różnych poziomach rozdzielczości”, którego podstawą jest 12 oryginalnych publikacji naukowych. Publikacje te są z lat 2015-2023 i stanowią cykl powiązany tematycznie. W dziewięciu publikacjach dr inż. Emilia Lubecka występuje jako pierwszy autor, co zwyczajowo w tej dyscyplinie oznacza dominujący wkład w ich powstanie, jeśli chodzi o przeprowadzenie badań i napisanie manuskryptu publikacji. Dodatkowo, w ośmiu pracach habilitantka występuje jako autor korespondencyjny (w jednej pracy jest dwóch takich autorów). W kilku pracach autorka jest pierwszym z dwóch autorów, co tym bardziej podkreśla jej znaczący udział w badaniach i przygotowaniu manuskryptów. Większość publikacji ma przyzwoity wskaźnik oddziaływania tzw. *impact factor* między 2 a 5. Artykuły zostały opublikowane w czasopiśmie

specjalistycznych, zaliczanych do dyscypliny nauki chemiczne i dotyczących modelowania oraz symulacji komputerowych, a także badań białek czy peptydów.

Warsztat naukowo techniczny habilitantki obejmuje metody modelowania molekularnego oparte na klasycznej dynamice molekularnej, zarówno pełnoatomowej jak i gruboziarnistej. Obejmuje też badania spektroskopii dichroizmu kołowego i magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) peptydów. Habilitantka ma też duże doświadczenie w testowaniu oprogramowania i pisaniu skryptów.

W pracach z lat 2015 i 2016, [H1] i [H2], w *European Biophysics Journal* i *Biopolymers*, habilitantka zajmowała się hormonami neuroprzysadkowymi, czyli cyklicznymi nonapeptydami. Przeprowadzała pełnoatomowe symulacje dynamiki molekularnej, aby określić strukturę i dynamikę tych peptydów, także w środowisku miceli naśladujących błonę eukariotyczną. Symulacje były wspomagane badaniami spektroskopii dichroizmu kołowego i NMR. Habilitantka analizowała widma i następnie wykorzystwała więzy ze spektroskopii NMR do symulacji dynamiki molekularnej. W efekcie, wyjaśniła różnice w strukturach peptydów wynikające z ich oddziaływania z micelami oraz liposomami i wytłumaczyła brak aktywności D-analogów tych peptydów. Określiła potencjalne role odgrywane przez błonę komórkową w przyjmowaniu aktywnych konformacji peptydów podobnych do wazopresyny.

Kolejne prace wchodzące w skład osiągnięcia dotyczą wniesienia indywidualnego wkładu dr inż. Emilii Lubeckiej w pakiet oprogramowania o nazwie UNICORN, służący do symulacji molekuł w reprezentacji gruboziarnistej w oparciu o fizyczne pole siłowe. Pierwszy z programów tego pakietu, UNRES, został zapoczątkowany w grupie prof. Harolda Scheragi i potem rozwijany w grupie prof. Adama Liwo. Kolejne rozszerzenia i podejścia zaowocowały programami NARES-2P i SUGRES-1P odpowiednio dla kwasów nukleinowych i cukrów. Dr Lubecka ma wspólne publikacje z grupą prof. Liwo, więc naturalnie brała udział w rozwijaniu pakietu UNICORN. Rozpoczęła od zaangażowania się w program UNRES umożliwiający symulacje dla pojedynczych białek w modelu gruboziarnistym.

W pracy [H3] w *Task Quarterly* w roku 2016, dr inż. Lubecka przepisała kod oprogramowania UNRES z języka Fortran77 na Fortran70, dokonała restrukturyzacji kodu, następnie przetestowała i uporządkowała cały pakiet do nowej wersji o nazwie UNRESPACK v. 4.0. Publikacja ta jest techniczna, ale ważna, gdyż taka modularyzacja kodu umożliwiła późniejszą rozbudowę pakietu UNRES o modele gruboziarniste kwasów nukleinowych (NARES-2P) i polisacharydów (SUGRES-1P). Wymagała też od habilitantki odpowiedniego warsztatu związanego ze znajomością języka Fortran.

W kolejnej pracy [H4] w *Journal of Chemical Physics* z roku 2017, habilitantka przeprowadziła parametryzację gruboziarnistego pola siłowego dla cukrów. Wykonała symulacje pełnoatomowej dynamiki molekularnej używając metody *umbrella sampling* w polu siłowym Amber dla disacharydów, aby na tej podstawie określić parametry oddziaływania pseudo-atomów w gruboziarnistym polu siłowym. Wyliczając potencjały średniej siły habilitantka opracowała odpowiednie potencjały dla poliglukozy. W późniejszej pracy [H7] z roku 2019, dr Lubecka ponownie brała udział w tworzeniu i parametryzacji pola siłowego dla cukrów, ale modelowym układem była heparyna.

W pracy [H5] opublikowanej w *Supercomputing Frontiers and Innovations* w roku 2018, podobnie jak w pracy [H3], dr Lubecka ponownie zajęła się optymalizacją algorytmów i kodu pola siłowego UNRES, aby umożliwić przeprowadzanie dłuższych symulacji dla dużych białek i ich kompleksów, do około 6000 aminokwasów, a także dynamiki molekularnej z wymianą replik.

W pracy [H6] z *Journal of Computational Chemistry* habilitantka zmodyfikowała kod UNRES, aby właściwie wykorzystywał więzy pochodzące z kontaktów. W tej pracy do pola siłowego UNRES wprowadziła możliwość nałożenia więzów z kontaktów między resztami z wykorzystaniem jako funkcji kary funkcji typu funkcji Lorenza z płaskim dnem, która była zaproponowana przez kolegów z grupy. Wprowadzone zmiany przetestowała na kilku białkach.

W dwuautorskiej pracy [H8], opublikowanej w roku 2021 w *J. Comput. Chem.*, habilitantka opracowała autorską metodę, którą nazwała ESCASA, do określania położenia protonów łańcucha głównego oraz przyłączonych do węgla C<sub>β</sub> na podstawie znajomości położenia łańcucha C<sub>α</sub>. Habilitantka w oparciu o dostępne struktury białek (pochodzące ze spektroskopii NMR) wyprowadziła analityczne wzory, które umożliwiają wyliczenie sił w sposób analityczny i użycie ich w symulacji. Umożliwia to symulacje dynamiki molekularnej w modelu zredukowanym z wykorzystaniem więzów pochodzących ze spektroskopii NMR. Położenia protonów wyznaczone w NMR dotyczą struktur pełnoatomowych, więc więzy na ich odległości nie mogą być bezpośrednio wykorzystane w modelach gruboziarnistych. Natomiast habilitantka opracowała w polu siłowym UNRES procedurę to umożliwiającą.

W pracy [H10] w *J. Comput. Chem.* opublikowanej w roku 2022 dr Lubecka zaimplementowała opracowaną przez nią metodę ESCASA z pracy [H8] do pola siłowego i programu UNRES. W ten sposób umożliwiła użytkownikom tego oprogramowania wykorzystanie więzów odległościowych z danych NMR podczas symulacji gruboziarnistych. Więzy na kontakty pochodzące ze spektroskopii NMR i ich właściwe zastosowanie w modelach gruboziarnistych nie są prostym problemem, więc doceniam wkład habilitantki w tego typu badania.

W kolejnej pracy [H11] z roku 2022 we *Front. Mol. Biosci.*, dr Lubecka wykorzystowała swoje wcześniejsze doświadczenie w implementacji więzów odległościowych z NMR i opisała napisane przez nią programy, które konwertowały dane z więzów NMR do formatów czytanych przez program UNRES.

W pracy [H9], opublikowanej w roku 2022 w *J. Phys. Chem. B*, habilitantka zastosowała pole siłowe UNRES i NARES-2P oraz pełnoatomowe pole siłowe Amber do zbadania oddziaływania białek prionowych z polimerem RNA. Przeanalizowała strukturę drugorzędową tych białek w obecności RNA i zmiany tej struktury w czasie symulacji.

W pracy [H12], opublikowanej w roku 2022 w *J. Comput. Chem.*, dr Lubecka znów powróciła do modyfikacji kodu UNRES i uczestniczyła w jego optymalizacji, m.in. zrównoleglenia w MPI. Dodała też moduł obsługujący dane z NMR oraz więzy na odległości między resztami.

Oceniam to osiągnięcie bardzo dobrze, ze względu na wkład pracy, a także spójność tematyczną, zwłaszcza prac [H3] - [H12]. Habilitantka miała znaczny wkład w rozwój gruboziarnistego pola

siłowego dla białek, kwasów nukleinowych i cukrów. W szczególności oprócz parametryzacji tych pól wprowadziła dodatkowe funkcje umożliwiające dodawanie więzów na kontakty z danych doświadczalnych NMR. Jest ekspertem w używaniu pola siłowego UNRES oraz w symulacjach dynamiki molekularnej w tym polu. Habilitantka ma zarówno prace aplikacyjne jak i związane z rozwijaniem metod i modeli gruboziarnistych.

### **Wkład habilitantki i oświadczenia współautorów**

Dr. Inż. Emilia Lubecka szczegółowo określiła swoje udziały w każdej z załączonych publikacji wymieniając zadania, które realizowała. Habilitantka załączyła do dokumentacji kopie podpisanych oświadczeń współautorów o ich udziale w publikacjach. Współautorzy w oświadczeniach opisali zrealizowane przez siebie zadania badawcze lub inne udziały, na przykład edytorskie. Tylko z jednym ze współautorów habilitantka nie mogła się skontaktować ze względu na przejście tej osoby na emeryturę i odejście z nauki. Z oświadczeń współautorów oraz habilitantki jasno wynika, że miała ona istotny wkład w stworzenie osiągnięcia naukowego przedstawionego do uzyskania przez nią stopnia doktora habilitowanego. Przedstawione osiągnięcie można więc uznać za indywidualny wkład habilitantki, mimo że powstałe publikacje są wieloautorskie. Oceniam wkład habilitantki za istotny. Przeprowadzała symulacje, pisała kod oprogramowania, analizowała symulacje, przygotowywała manuskrypty publikacji i w wielu z nich była autorem korespondencyjnym.

### **Aktywność naukowa w więcej niż jednej uczelni**

Jak opisałam w pierwszej części mojej opinii, habilitantka po uzyskaniu stopnia doktora pracowała w kilku jednostkach, najpierw na Politechnice Gdańskiej, potem przez pięć lat na Uniwersytecie Gdańskim. Od roku 2020 znów pracuje na Politechnice Gdańskiej na stanowisku adiunkta. Na przełomie roku 2022/2023 odbyła ośmiomiesięczny staż podoktorski w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Oprócz tego nawiązała współpracę z prof. Hansmannem w USA i w roku 2019 spędziła kilka miesięcy na Uniwersytecie Oklahoma. Ta współpraca zaowocowała w roku 2022 dwuautorską publikacją w *J. Chem. Phys. B*.

### **Pozostałe osiągnięcia i dorobek habilitantki**

Całkowity dorobek habilitantki liczy 34 artykuły, cztery z nich to artykuły pokonferencyjne. Po uzyskaniu stopnia doktora dorobek publikacyjny dr inż. Lubeckiej w czasopiśmie z listy *Journal Citation Reports* składa się na 26 publikacji; 12 z tych publikacji stanowi osiągnięcie habilitacyjne. Prace ze współautorstwem habilitantki są sumarycznie dobrze cytowane jak na ten etap kariery naukowej (ok. 400 razy wg. bazy Scopus). Indeks Hirsha w tej bazie wynosi 10. Oceniam, że jest to dorobek przyzwoity jak na etap kariery tuż przed habilitacją.

Z przedstawionego mi autoreferatu wynika, że dr Emilia Lubecka jest aktywna naukowo. Habilitantka jest wykonawczynią w wielu grantach, także międzynarodowych. Sama kierowała dwoma grantami wewnętrznymi uczelni oraz projektem Preludium jeszcze przed uzyskaniem stopnia doktora. Kierowała też grantami obliczeniowymi w infrastrukturze PLGrid. Natomiast nie kierowała żadnym grantem, który byłby finansowany zewnętrznie i w którym występowałaby jako główny kierownik całego projektu.

Dr inż. Emilia Lubecka zaprezentowała osobiście swoje badania na ponad dwudziestu konferencjach. Na kilku z nich miała prezentacje ustne. Uważam, że jak na kilkanaście lat badań, mimo pandemii Covid-19, aktywność konferencyjna habilitantki mogłaby być większa. Działalność organizacyjna nie jest bogata, podobnie jak recenzowanie manuskryptów publikacji – wymieniono tylko trzy recenzje. Mam nadzieję, że tego typu działalność habilitantka będzie mogła rozszerzyć.

Uważam, że dr Lubecka może już podjąć się samodzielnie prowadzenia i promowania doktorantów. Sugeruję stworzenie własnej tematyki badawczej, ale odrębnej od dotychczasowej. Ułatwi to habilitantce aplikacje o granty zewnętrzne jako kierownik projektu. Tematyka może być oczywiście oparta o dotychczasowe oprogramowanie, ale powinna wyróżniać habilitantkę i nie ograniczać tematycznie do rozwijania i testów znanego już od wielu lat w środowisku naukowym oprogramowania do symulacji modeli zredukowanych. Uważam, że obranie przez habilitantkę nowego kierunku będzie teraz najistotniejszym elementem jej dalszej kariery.

### **Wniosek końcowy**

Podsumowując, uważam, że praca habilitacyjna dr Emilii Lubeckiej wnosi istotny wkład w metody modelowania struktury i oddziaływania biomolekuł, w szczególności w modele gruboziarniste i w rozwój oprogramowania służącego do symulacji tych modeli metodami dynamiki molekularnej ze wzmocnionym próbkowaniem i z możliwością uwzględnienia więzów pochodzących z danych doświadczalnych. Stwierdzam, że przedstawione mi do oceny materiały stanowią podstawę do ubiegania się przez dr Emilię Lubecką o stopień doktora habilitowanego. Oceniam, że dr Emilia Lubecka w pełni spełnia warunki zwyczajowe i ustawowe wymagane do nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk chemicznych. Cykl publikacji stanowi znaczny i istotny wkład w rozwój tej dyscypliny. Stwierdzam, że osiągnięcia naukowe dr Emilii Lubeckiej odpowiadają wymaganiom określonym w art. 219 ust. 1 pkt 2 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (ze zm.) i moja ocena tych osiągnięć jest pozytywna.