



UNIWERSYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

Gdańsk, 30 grudnia 2018 r.

Opinia o osiągnięciach naukowych dra Adama Sieradzana w związku z postępowaniem o nadanie Mu stopnia doktora habilitowanego

Niniejszą opinię sporządziłem na wniosek Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów, która działając w oparciu o art. 18a ust. 5 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytułach naukowych oraz o stopniach i tytułach w zakresie sztuki (Dz.U. z 2017 r. poz. 1789) powołała dnia 18 listopada 2018 r. komisję habilitacyjną, wyznaczając mi rolę recenzenta.

W roku 2009 dr Adam Sieradzan uzyskał tytuł zawodowy magistra broniąc pracę magisterską na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego (UG). W latach 2009-2013 był prawdopodobnie uczestnikiem studiów doktoranckich na tym samym wydziale. Piszę „prawdopodobnie” ponieważ informacja ta nie wynika bezpośrednio z dokumentów przedłożonych przez Habilitanta, ale fakt kierowania przez Niego w latach 2011 i 2012 projektami finansowanymi przez Wydział Chemii UG w ramach środków na finansowanie zadań służących rozwojowi młodych naukowców oraz uczestników studiów doktoranckich, a także brak informacji o zatrudnieniu w tym okresie, każą przypuszczać, że lata 2009-2013 Kandydat spędził na Wydziale Chemii UG jako doktorant. W roku 2013 Rada Naukowa Wydziału Chemii UG przyznała Panu Sieradzanowi stopień doktora nauk chemicznych za pracę zatytułowaną: „Zwiększenie rozdzielczości i zdolności predykcyjnych pola siłowego UNRES do symulacji zwijania białek poprzez udoskonalenie potencjałów opisujących oddziaływania z udziałem łańcucha głównego”, której promotorem był prof. dr hab. Adam Liwo. Kolejny, 2014 rok, Habilitant spędził na stażu podoktorskim w grupach prof. Antti Niemiego, głównie w Szwecji w Uniwersytecie w Uppsali, ale również w Chinach w Beijgin Institute of Technology oraz w Brazylii w International Institute of Physics Federal University of Rio Grande de Norte. Po powrocie ze stażu dr Sieradzan zatrudnił się jako specjalista analityk w CI TASK na Politechnice Gdańskiej, gdzie pracował do października 2015 roku. Praca ta stanowiła zajęcie tymczasowe i gdy tylko Kandydat otrzymał finansowanie swojej działalności naukowej najpierw z programu Iuventus Plus Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego (na okres 17 miesięcy), a potem Sonata Narodowego Centrum Nauki (na okres 24 miesięcy), samozatrudnił się, między wrześniem 2015 a styczniem 2018 roku, na



UNIwersytet Gdański



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

stanowisku adiunkta naukowego na Wydziale Chemii UG w grupie prof. Liwo. Od stycznia bieżącego roku dr Adam Sieradzan pracuje na stabilnym stanowisku asystenta opłacanym przez Wydział Chemii UG. Kariera naukowa dra Sieradzana jest przykładem tego jak zdolności, determinacja, pracowitość i jasno wyznaczony cel, w tym przypadku chęć uprawiania nauki owocują uzyskaniem stałego etatu naukowego. W tym miejscu z ubolewaniem muszę stwierdzić, iż brak powszechnych mechanizmów zatrzymywania talentów pozwala zatrudnić jednostki wybitne praktycznie tylko wówczas, gdy posiadają one wyjątkową zdolność do zdobywania środków na prowadzenie własnych badań.

Lektura dokumentacji dołączonej do wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego wskazuje na wyjątkowo spójną tematykę badawczą, którą Kandydat zajmował się już w czasie studiów doktoranckich. Rzeczywiście, Jego praca doktorska dotyczyła rozwinięcia podejścia UNRES w kierunku zwiększenia rozdzielczości i zdolności predykcyjnych metody, zaś na osiągnięcie naukowe zatytułowane „Modelowanie oddziaływań z udziałem biomolekuł na różnych poziomach rozdzielczości” składa się 12 prac poświęconych modyfikacjom pola UNRES (i jego odmiany NARES) oraz zastosowaniom zmodyfikowanego narzędzia do badań konformacyjnych biomolekuł. I tak, posiłkując się wynikami własnych badań, Habilitant doszedł do wniosku, iż do poprawy dokładności pola UNRES konieczne jest wprowadzenie potencjałów opisujących sprzężenie między ruchem łańcucha głównego i łańcuchów bocznych reszt aminokwasowych. Podobnie, Kandydat zmodyfikował potencjały torsyjne w polu UNRES w taki sposób, że potencjał średniej siły zależy nie tylko do kąta torsyjnego, ale i od kątów między dwoma wiązaniami wirtualnymi. Jednocześnie pokazał, że użycie tego typu wyrażenia prowadzi do znaczącej poprawy przewidywań, bowiem stosowanie standardowych potencjałów torsyjnych w polach gruboziarnistych daje istotne błędy, szczególnie w przypadkach, w których kąty między wiązaniami wirtualnymi charakteryzuje duża zmienność. Kolejną modyfikacją metodologiczną było prowadzenie do pola UNRES efektów ekranowania (uzależnienie energii oddziałujących dwóch grup peptydowych od obecności łańcuchów bocznych w ich najbliższym otoczeniu). Tego typu udoskonalenie prowadzi do wzrostu szybkości zwijania testowego zbioru białek od 2 do nawet 1000 razy. Kontynuując prace nad poprawą działania pól gruboziarnistych, Habilitant uogólnił pole UNRES na przypadek oddziaływania białko-nanorurka węglowa, a następnie wykonał symulacje pokazujące znaczne zmiany konformacyjne białka w przypadku oddziaływania chymotrypsyna-nanorurka. Wynik ten sugeruje możliwą toksyczność nanorurek. Kandydat rozszerzył potencjały średniej siły na opis oddziaływań centrów gruboziarnistych w układach białko-DNA (jednoczesne użycie pola UNRES i NARES), a także wprowadził do pola UNRES



UNIwersytet GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

periodyczne warunki brzegowe (PBC), co doskonale poprawiło opis procesu asocjacji białek. Tego typu podejście do problemu asocjacji wydaje się być metodą lepszą od nakładanie więzów na odległość N- i C-końca oddziałujących peptydów. Habilitant zaimplementował również metodę sterowanej dynamiki molekularnej i wykorzystał ją do zbadania rozwijania tytyny i kontaktyny przy pomocy tak zmodyfikowanego pakietu UNRES.

Opisane wyżej udoskonalenia metodologiczne umożliwiły dr. Sieradzanowi wykonanie szeregu symulacji dla układów biologicznych takich jak małe peptydy, mioglobina, tytyna czy telomery. W kontekście powrotu niepoprawnie zwiniętego białka do konformacji natywnej Habilitant zbadał mechanizm przesuwania pętli w łańcuchu głównym domeny białka wiążącego albuminę. Symulacje sterowaną dynamiką molekularną wykazały podwyższoną odporność mechaniczną sekwencji telomerowych oraz ich tendencję do tworzenia trypleksów. W końcu pole UNRES zostało wykorzystane przez Kandydata do zwinięcia białka o właściwościach bakteriobójczych - turincyny H. Badania te pokazały, że procesowi powstawania konformacji natywnej towarzyszy sekwencyjne tworzenie mostków tioeterowych z udziałem węgla alfa.

Lektura wykazu publikacji (załącznik 3; 6 publikacji przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora oraz 23 prace (włączając w to prace składające się na osiągnięcie) po otrzymaniu stopnia doktora) pokazuje, że Habilitant od początku swojej działalności zajmował się symulacjami związanymi z przemianami konformacyjnymi peptydów i białek. Jedynie dwie publikacje ze wspomnianego wyżej wykazu dotyczą eksperymentalnych badań nad inhibicją trypsyny (badania kinetyczne inhibitorów trypsyny oraz synteza fluorescencyjnych analogów takich inhibitorów). Zwraca uwagę fakt, że jeszcze przed uzyskaniem stopnia doktora Kandydat pełnił rolę autora korespondencyjnego.

Już ta krótka charakterystyka działalności badawczej dra Sieradzana pokazuje, że jest On dojrzałym naukowcem, realizującym własną tematykę badawczą. **Moja opinia o osiągnięciach naukowo-badawczych Kandydata musi więc być pozytywna.** Opinia ta została przygotowana w oparciu o kryteria zawarte w rozporządzeniu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego (Dz.U Nr 196, Poz. 1165, z dnia 1 września 2011 r.) oraz dokumentację opracowaną przez dra Sieradzana, na którą składają się:

- a) wniosek z 14 sierpnia 2018 r. o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego,
- b) poświadczona kopia dyplomu doktorskiego,
- c) autoreferat (wersje polska i angielska),



UNIWERSYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

- d) dorobek naukowy wraz z oświadczeniem dotyczącym wykonanych prac i procentowego w nich udziału (wersje polska i angielska),
- e) opis osiągnięć naukowo-badawczych i edukacyjnych (wersja polska i angielska),
- f) oświadczenia współautorów prac stanowiących osiągnięcie naukowe wnioskodawcy,
- g) kopie prac stanowiących osiągnięcie naukowe wnioskodawcy.
- h) płyta CD zawierająca: autoreferat (wersje polska i angielska); dorobek naukowy wraz z oświadczeniem wnioskodawcy dotyczącym wykonanych prac i procentowego w nich udziału (wersje polska i angielska); opis osiągnięć naukowo-badawczych i edukacyjnych (wersja polska i angielska); kopie prac stanowiących osiągnięcie naukowe w formacie pdf oraz zeskanowane oświadczenia współautorów prac stanowiących osiągnięcie naukowe wnioskodawcy.

- Na osiągnięcie naukowe Habilitanta składa się 11 oryginalnych publikacji oraz jeden rozdział w książce opublikowane w latach 2014-2018 w dobrych czasopismach międzynarodowych znajdujących się w bazie Journal Citation Reports takich jak: Phys. Rev. E, J. Chem. Theory Comput., J. Comput. Chem. czy J. Chem. Phys. B. Współczynnik wpływu (IF) tych czasopism mieści się w zakresie 1,5-5,4, a publikacje tworzą monotematyczny cykl dotyczący rozwinięcia gruboziarnistego pola UNRES oraz modelowania przy jego pomocy biomolekuł ze szczególnym uwzględnieniem ich przemian konformacyjnych. Cykl ten pełni rolę osiągnięcia naukowego w myśl ustawy o stopniach naukowych. Oświadczenia współautorów oraz deklaracja własnego wkładu Habilitanta w przygotowanie wspomnianych publikacji nie pozostawia żadnych wątpliwości co do wiodącej roli Kandydata w powstaniu osiągnięcia.

- Sumaryczny IF dla ocenianego cyklu prac wynosi 34,207, co daje średnio 3,110 na jedną pracę. Parametry te dla całkowitego dorobku dra Sieradzana, na który składa się 29 publikacji, wynoszą odpowiednio 117,871 i 4,065. Moim zdaniem są to bardzo dobre charakterystyki.

- Według danych bazy Web of Science publikacje Kandydata były cytowane 155 razy (bez autocytowań). Zatem jest to dorobek znaczący, który został dostrzeżony i doceniony przez środowisko naukowe.

- Według tej samej bazy bibliograficznej indeks Hirscha dla całego dorobku Habilitanta wynosi 10, co można uznać za wynik bardzo dobry, odpowiadający obecnemu etapowi kariery Kandydata.



UNIWERSYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

- w 2008 r. dr Sieradzan był beneficjentem stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego (MNiSW) dla wybitnych studentów, a w roku 2013 stypendium MNiSW dla wybitnych doktorantów. W latach 2013 i 2014 otrzymywał stypendium START Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej (FNP). W roku 2014 otrzymał również stypendium Visby Szwedzkiego Ministra Nauki i Kultury, a jego praca doktorska została uhonorowana nagrodą Polskiego Towarzystwa Chemicznego.

- Kandydat może poszczycić się ponadprzeciętną aktywnością związaną z pozyskiwaniem środków na prowadzenie badań. Mianowicie kierował projektami finansowanymi w ramach programów: Preludium Narodowego Centrum Nauki, Iuventus Plus Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz Sonata Narodowego Centrum Nauki. Od bieżącego roku kieruje trzyletnim projektem finansowanym przez program Opus Narodowego Centrum Nauki.

- Poza znacznym dorobkiem posterowym (40 prezentacji konferencyjnych), dr Sieradzan wygłosił 7 wykładów na zaproszenie na krajowych i międzynarodowych konferencjach naukowych. Jest to aktywność świadcząca o uznaniu środowiska naukowego.

Oceniając dorobek dydaktyczny i popularyzatorski Kandydata oraz Jego współpracę międzynarodową mogę stwierdzić, że spełniają one całkowicie wymogi ustawowe i zwyczajowe dla Kandydatów do stopnia doktora habilitowanego.:

- Dr Adam Sieradzan odbył jeden długoterminowy staż podoktorski (Uppsala University, Beijing Insititut of Technology i International Insitue of Physics Fedaral University of Rio Grande de Norte; 2014 r., prof. A. Niemi) oraz szereg krótkoterminowych zagranicznych staży naukowych (Oklahoma University, 3 miesiące 2012 r., prof. U. Hansmann; Cornell University, 3 miesiące 2013 r., prof. H. Scheraga; Korean Insitute for Advanced Studies, 2 miesiące 2016 r., prof. J. Lee). W tym miejscu podkreślę, że aktywność wyjazdowa Kandydata znacznie przekracza przeciętną aktywność w tym zakresie dzisiejszych pretendntów do stopnia doktora habilitowanego.

- Recenzował publikacje dla międzynarodowych czasopism naukowych takich jak: Proc. Nalt. Acad, Sci. USA, J. Am. Chem. Soc., Mol. Phys., Mini Rev. Med. Chem., Sci. Rep. czy J. Mol. Struc.

- Był członkiem komitetu organizacyjnego czwartej Polsko – Koreańskiej Konferencji dotyczącej Zwijania Białek (2018 r.); w latach 2012 i 2017 współorganizował Bałtycki Festiwal Nauki, a w roku 2009



UNIWERSYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

dwudziestą edycję Polskiego Sympozjum Peptydowego. Kilkakrotnie współorganizował Dni Otwarte na Wydziale Chemii UG.

- Sprawował opiekę naukową nad doktorantami pełniąc funkcję promotora pomocniczego w trzech przewodach doktorskich.

- Na Wydziale Chemii UG prowadził zajęcia laboratoryjne z chemii ogólnej i nieorganicznej, zajęcia laboratoryjne i wykłady z programowania, zajęcia z technologii informacji oraz z elektrodagnostyki chemicznej.

Reasumując, stwierdzam, że dr Adam Sieradzan jest dojrzałym naukowcem, dysponującym świetnym warsztatem badawczym oraz tematyką umożliwiającą kontynuowanie badań po uzyskaniu stopnia dra habilitowanego. Moim zdaniem posiada On wszystkie przymioty konieczne do stworzenia własnej grupy badawczej. Kandydat legitymuje się poważnym dorobkiem naukowym i uznaniem środowiska. Jest również dobrze przygotowany do prowadzenia działalności dydaktycznej i organizacyjnej.

Odnosząc się do wymogów ustawowych, nie mam więc najmniejszych wątpliwości, że przedstawiony mi do oceny cykl 12 publikacji naukowych stanowi **znaczący wkład** Autora w rozwój badań nad dynamiką oddziaływań biomolekuł, i że Habilitant wykazuje na tym polu **istotną aktywność naukową**. Uważam, iż przedstawiony materiał spełnia całkowicie wymogi Ustawy i uzasadnia nadanie dr. Adamowi Sieradzanowi stopnia doktora habilitowanego.