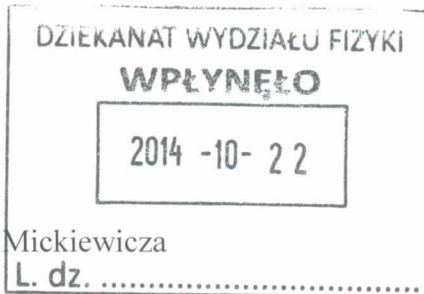


dr hab. Jacek Gapiński, prof. UAM  
Zakład Biofizyki Molekularnej  
Wydział Fizyki, Uniwersytet im. A. Mickiewicza  
Umultowska 85 61-614 Poznań



Poznań, 19.10.2014 r.

**Ocena dorobku naukowego dra Macieja Długosza ze szczególnym uwzględnieniem osiągnięcia naukowego przedstawionego w cyklu monotematycznych prac o tytule „Dynamika brownowska w modelowaniu dyfuzji i asocjacji biomolekul – efekty anizotropii, oddziaływań hydrodynamicznych i molekularnego tłoku”, stanowiących podstawę postępowania habilitacyjnego**

Dr Maciej Długosz ukończył studia magisterskie na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego w roku 2002. Już tematyka jego pracy magisterskiej zdradziła jego zainteresowania naukowe, którym pozostał wierny do dnia dzisiejszego, a mianowicie zastosowanie metod numerycznych do modelowania procesów fizycznych o znaczeniu biologicznym. W swoim doktoracie skupił się na algorytmach dynamiki molekularnej w ich zastosowaniu do związków modelowych i małych peptydów. Tematyka będąca treścią ocenianego osiągnięcia naukowego wydaje się być naturalną konsekwencją drogi obranej przez habilitanta na początku jego kariery naukowej.

Wraz z wnioskiem o wszczęcie postępowania habilitacyjnego do Centralnej Komisji do Spraw Stopni Naukowych i Tytułu Naukowego doktor Maciej Długosz załączył komplet dokumentów. Przedstawiona mi za pośrednictwem Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego dokumentacja jest od strony formalnej pełna, spełnia wymogi ustawowe i nie budzi moich zastrzeżeń. Dokumentacja została przygotowana bardzo starannie, co ułatwia ocenę dorobku habilitanta.

**Ocena osiągnięcia naukowego**

Na wskazane szczególne osiągnięcie naukowe składa się cykl 6 prac zatytułowany „Dynamika brownowska w modelowaniu dyfuzji i asocjacji biomolekul – efekty anizotropii, oddziaływań hydrodynamicznych i molekularnego tłoku”. Pierwsza z nich (A), będąca pracą przeglądową, przedstawia dotychczasowe osiągnięcia dynamiki brownowskiej w ośrodkach zatłoczonych oraz, co najważniejsze, możliwości i perspektywy jej zastosowania w warunkach molekularnego tłoku panującego we wnętrzu komórek biologicznych. Praca ta kończy się konkluzją, że stopień skomplikowania zjawisk zachodzących w takich warunkach

praktycznie wyklucza przeprowadzenie dokładnych obliczeń na poziomie atomowym i kluczowym zagadnieniem w tej dziedzinie stanie się opracowanie nowych hybrydowych algorytmów łączących podejście atomowe tam gdzie jest to niezbędne z bardziej zgrubnymi modelami bazującymi na aminokwasach lub nukleotydach i wreszcie z modelami mezoskopowymi.

Druga w kolejności praca z cyklu (B) realizuje te założenia, stawiając „numeryczne podwaliny” pod dalsze prace. Przedstawiono w niej modele i algorytmy umożliwiające symulacje wieloskładnikowych układów molekuł biologicznych z uwzględnieniem różnego rodzaju oddziaływań w różnych skalach: od atomowej do gruboziarnistej.

W pracach C i E narzędzia te wykorzystano do wykazania ogromnej roli oddziaływań hydrodynamicznych w procesie asocjacji cząsteczek, obserwując przy okazji wiele bardzo ciekawych efektów, jak np. „sterowanie hydrodynamiczne”. Zaobserwowano istotną rolę anizotropii kształtu w dynamice asocjujących cząsteczek, co w dotychczasowych uproszczonych modelach nie mogło być obserwowane.

Praca D stanowiła wyzwanie pod względem obliczeniowym, ponieważ miała na celu symulację ruchu asocjujących cząsteczek białka w rozdzielczości atomowej. Wykazano, że tylko w taki sposób uwzględnić można wszystkie występujące w tym zjawisku efekty, a stosowane zazwyczaj gruboziarniste uproszczenia mogą dawać wyniki znacznie odbiegające od rzeczywistości.

Zwieńczeniem prac związanych z dynamiką brownowską cząsteczek o dowolnym kształcie jest pozycja szosta cyklu (F), w której badana jest dyfuzja rotacyjna cząsteczek anizotropowych w warunkach bardzo silnego stłoczenia molekularnego, porównywalnego tym w żywej komórce.

W mojej opinii przedstawiony cykl prac stanowi spójny obraz procesu postawienia i rozwiązania problemu naukowego, przy czym dodatkowo samodzielnie sporządzono narzędzia do tego celu w postaci skutecznych procedur numerycznych. Procedurom tym nadano postać gotowych programów, które zostały udostępnione społeczności naukowej, co zwiększa jeszcze ich atrakcyjność.

Zamieszczone oświadczenia współautorów nie pozostawiają wątpliwości, że głównym inicjatorem i wykonawcą w tym procesie był dr Maciej Długosz.

Moje zastrzeżenia budzi jedynie praktyczny brak próby doświadczalnego potwierdzenia uzyskanych rezultatów. Wydaje się, że dostępne techniki fluorescencyjne pozwalają na precyzyjny pomiar współczynników dyfuzji translacyjnej zarówno cząsteczek izolowanych jak i w warunkach silnego stłoczenia. Podobnie łatwo można mierzyć odległość

między asocjującymi białkami dzięki zjawisku FRET, chociaż istotną przeszkodą może być szybkość reakcji w wysokich stężeniach. Zachęcam habilitanta do współpracy z biologami lub biofizykami wyposażonymi w odpowiednie narzędzia badawcze.

### **Ocena dorobku naukowego**

Liczba prac opublikowanych przez habilitanta do momentu wysłania wniosku to 27 pozycji, wszystkie w czasopismach o wysokim współczynniku IF (sumaryczny IF = 89), co jest wynikiem w zupełności wystarczającym. Liczba cytowań osiągnęła wartość 200 (bez autocytowań), co przełożyło się na indeks Hirscha równy 8. Statystyka cytowań z pewnością poprawi się z czasem, a jej chwilowo niska wartość wynika po prostu z faktu, że większość prac ukazała się bardzo niedawno.

Habilitant brał udział jako wykonawca w kilku projektach badawczych, z czego w jednym zagranicznym i jednym międzynarodowym. O osiągnięciu samodzielności w tej dziedzinie świadczy fakt pełnienia funkcji lidera jednej z grup roboczych w tym ostatnim projekcie oraz kierowanie własnym projektem finansowanym przez Narodowe Centrum Nauki.

Na uwagę zasługuje również uzyskane przez habilitanta stypendium dla młodych wybitnych naukowców przyznane przez Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego na lata 2012-2015.

### **Ocena dorobku organizacyjnego i dydaktycznego**

O uzyskaniu pewnej renomy w swojej dziedzinie świadczy dziesięć wygłoszonych wykładów na konferencjach międzynarodowych oraz kilkanaście napisanych recenzji publikacji dla renomowanych czasopism.

Kilkumiesięczne staże w renomowanych ośrodkach zagranicznych zaowocowały wspólnymi publikacjami.

Ze względu na charakter zatrudnienia, coraz częstszy w obecnej rzeczywistości nauki polskiej, habilitant nie miał obowiązku, a prawdopodobnie również technicznych możliwości wykonywania pracy dydaktycznej na uczelni. Niemniej, o jego kompetencjach w tej dziedzinie może świadczyć opieka merytoryczna sprawowana nad studentami odbywającymi wakacyjne praktyki w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego UW oraz merytoryczna opieka nad pracą magisterską pana Macieja Jasińskiego i jej współpromotorstwo (2011). Na plus należy policzyć fakt wyróżnienia pracy w konkursie Polskiego Towarzystwa Bioinformatycznego. O rzeczywistych kompetencjach



dydaktycznych habilitanta będzie musiał przekonać się osobiście Dziekan zatrudniającego go wydziału, jeśli do takiego zdarzenia w przyszłości dojdzie. Obecnie w podobnej sytuacji znajduje się spory odsetek habilitantów i niewiele można w tej sprawie poradzić ze względu na malejącą liczbę studentów oraz nawał obowiązków naukowych na etatach finansowanych z projektów badawczych. W mojej ocenie nie może być to przeszkodą w uzyskaniu stopnia doktora habilitowanego.

### **Podsumowanie**

Reasumując, pozytywnie oceniam zarówno przedstawione przez habilitanta osiągnięcie naukowe jak i udokumentowaną istotną aktywność naukową, na którą składają się wymienione powyżej aspekty. Uważam, że spełniają z nawiązką wymogi stawiane przez „Ustawę o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki” z dnia 14 marca 2003 wraz z późniejszymi poprawkami w części dotyczącej stopnia doktora habilitowanego.

W związku z tym wnioskuję o dopuszczenie doktora Macieja Długosza do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Jacek Gapiński

