



14 maja 2019 r.

Prof. dr hab. inż. Waclaw Andrzej Sokalski
Katedra Inżynierii i Modelowania Materiałów Zaawansowanych

Politechnika Wroclawska
Wyb. Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

Ocena osiągnięcia naukowego p.t. „Empiryczne pola siłowe, jako narzędzie w badaniu właściwości biologicznych wybranych białek receptorowych, proteaz serynowych oraz białek osocza” oraz istotnej aktywności naukowej dr Artura Giełdonia w związku z toczącym się postępowaniem habilitacyjnym

Pan dr Artur Giełdoń ukończył w roku 1999 studia wyższe na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego, a następnie w roku 2004 obronił na tym samym Wydziale rozprawę doktorską pt. „Modelowanie molekularne oddziaływań receptorów wazopresyny i oksytocyny z wybranymi bioligandami” pracując pod kierunkiem prof. dr hab. Jerzego Ciarkowskiego. W latach 2000-2001 pracował w charakterze technika w Ośrodku Informatycznym Uniwersytetu Gdańskiego, a następnie asystenta na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego w latach 2004-2005. W latach 2005-2008 Dr Giełdoń odbył podoktorskie staże naukowe w Uniwersytecie J.W. Goethego w Frankfurcie, pracując w grupie badawczej kierowanej przez prof. Schwalbe oraz w University of Florence we Włoszech.

Od roku 2008 dr Artur Giełdoń pracuje na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego, początkowo jako specjalista ds. informatyki, a następnie adiunkt.

Ocena osiągnięcia naukowego

Przejdę teraz do oceny osiągnięcia naukowego dr Giełdonia opartego na 12 publikacjach w renomowanych czasopismach międzynarodowych wchodzących w skład tzw. listy filadelfijskiej. Cykl publikacji jest spójny tematycznie i ogólnie dotyczy modelowania właściwości białek, głównie metodą dynamiki molekularnej, dostarczając informacji niedostępnych doświadczalnie lub je istotnie uzupełniając i wyjaśniając ich funkcję (H5 i H12).

Pierwszą grupę zagadnień podjętych przez dr Giełdonia stanowi badanie oddziaływań ligandów z białkami, zarówno gdy znane jest miejsce wiązania (prace H1 i H8) oraz gdy brak jest takich informacji (prace H6 i H11). Warto zaznaczyć, że z uwagi na obecność olbrzymiej liczby minimów lokalnych przewidywanie struktury kompleksów białek z ligandami jest zagadnieniem bardzo złożonym, wymagającym dużego doświadczenia oraz dużej dozy krytycyzmu względem wyników uzyskiwanych technikami opartymi na klasycznych i ciągle niestety zawodnych polach siłowych. Świadectwem tego może być dyskusja dotycząca pracy H1.

Drugą zasadniczą część rozprawy stanowiło badanie złożonych procesów aktywacji białek wymuszonych aktywatorem (prace H2, H3, H4, H9 oraz H10) wymagające uzupełnienia brakujących danych drogą modelowania przez homologię i dynamiką molekularną przy wykorzystaniu więzów uzyskanych drogą doświadczalną metodą NMR. Istotną rolą tych badań była interpretacja obserwowanych widm CD oraz funkcji poszczególnych fragmentów białka wydedukowaną przy pomocy wprowadzanych mutacji.

Dodatkowym elementem aktywności dr Giełdonia było uzupełnienie standardowego pakietu oprogramowania RASMOL o nowe funkcje umożliwiające analizę danych biomolekularnych i ich lepszą ilustrację graficzną (praca H7).

Na istotną rolę dr Giełdonia w badaniach naukowych opisanych w tych pracach mogą wskazywać jego własne oświadczenia stwierdzające 50% lub większy udział w 5 pracach oraz średnio 46% we wszystkich 12 pracach. W dwóch pracach H1 oraz H7 dr Artur Giełdoń był autorem korespondencyjnym. Ze względu na zespołowy i interdyscyplinarny charakter tych prac, w których zaangażowani byli eksperymetatorzy, wydaje się to zrozumiałe. Szkoda tylko, że we wniosku zabrakło oświadczeń współautorów.

Do najważniejszych osiągnięć naukowych uzyskanych przez dr Giełdonia można zaliczyć:

- a) Wyjaśnienie efektów inhibicyjnych w neprolizynie i aminopeptydazie N które później były podstawą do zaprojektowania nowych inhibitorów.
- b) Zaproponowanie możliwego mechanizmu wiązania się trygoneliny z modelowym złogiem amyloidowym

- c) Zaproponowanie możliwych wariantów wiązania fullereny z białkami osocza krwi
- d) Identyfikację konformacji bradykininy prowadzącej do jej aktywacji
- e) Istotne rozszerzenie funkcji programu RASMOL w zakresie wizualizacji struktur białek

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

Świadczy to o tym, że dr Giełdoń dysponuje doświadczeniem oraz warsztatem badawczym pozwalającym na samodzielne rozwiązywanie złożonych problemów z zakresu modelowania molekularnego procesów zachodzących w układach białkowych.

Do osiągnięć naukowych dr Giełdonia należy dodać wygłoszenie zaproszonego referatu na konferencji międzynarodowej w Korei oraz przedstawienie 21 prezentacji w charakterze głównego autora i 36 jako współautora, głównie na konferencjach krajowych. Prawdopodobnie było to konsekwencją braku własnych grantów badawczych.

Ocena istotnej aktywności naukowej

Dr Artur Giełdoń opublikował łącznie 39 oryginalnych prac, z czego 35 pozycji po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych. Ze wspomnianych 39 prac, wszystkie opublikowano w czasopiśmie z listy filadelfijskiej, w tym w tak renomowanych czasopiśmie międzynarodowych jak: ChemBioChem, Journal of Biological Chemistry, Future Medicinal Chemistry, FEBS Journal, PLOS ONE, Journal of Computational Chemistry, Journal of Molecular Graphics and Modelling, Proteins – Structure, Dynamics and Bioinformatics, Journal of Computer-Aided Molecular Design, Journal of Chemical Physics,

Sumaryczny czynnik oddziaływania czasopiśm w których były publikowane prace dr Giełdonia wynosi 97.665 (w tym prace wchodzące w skład rozprawy habilitacyjnej 35.491), a współczynnik Hirscha 11. Do maja 2019 roku publikacje dr Giełdonia były cytowane przez innych autorów 281 razy (bez autocytowań), prawie trzykrotnie 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.

Jak wskazują informacje podane w publikacjach dr Giełdonia, były one finansowane z grantów MEN, MNiSzW oraz grantów NCN. Dr Giełdoń pełnił w nich rolę wykonawcy, ale nie kierował osobiście żadnym z nich.

Sytuacja ta może prawdopodobnie wynikać z faktu, że fundusze te mogły być przeznaczone na wykonanie kosztownych prac doświadczalnych prowadzonych przez pozostałych współautorów, podczas gdy do obliczeń teoretycznych dr Giełdoń dysponował dostępnymi nieodpłatnie mocami obliczeniowymi w Uczelnianym Ośrodku Informatycznym względnie TASK. W tym zakresie dorobek należy jednak uznać za wyjątkowo skromny, jak dla osoby aspirującej do samodzielnej pozycji naukowej. Bez wątplenia Habilitant powinien w przyszłości wykazać więcej inicjatywy w zakresie pozyskiwania środków na finansowanie badań, koncentrując się na doskonaleniu i rozwoju nowych metod obliczeniowych, co zwykle jest podstawą samodzielnych wniosków grantowych teoretyków.

Dr Artur Giełdoń rozwinął i kontynuuje szeroko zakrojoną współpracę z krajowymi i zagranicznymi doświadczalnymi zespołami badawczymi, czego efektem jest większość jego dorobku naukowego.

Doświadczenie Kandydata w pracy dydaktycznej obejmuje prowadzenie wykładów i laboratorium z przedmiotów: technologii informacyjnej, chemii teoretycznej oraz autorskich kursów „Matematyczne podstawy modelowania molekularnego” oraz „Elektroniczna diagnostyka chemiczna”.

Niezależnie dr Giełdoń był promotorem 2 prac magisterskich i pełnił rolę promotora pomocniczego jednej rozprawy doktorskiej oraz recenzował 11 prac magisterskich.

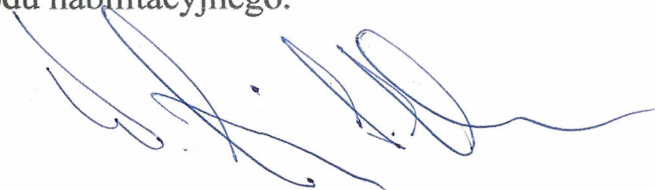
W zakresie działalności popularyzatorskiej dr Giełdoń wykazywał dużą aktywność jako współorganizator warsztatów popularno-naukowych, zajęć interdyscyplinarnych, dni otwartych na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. Ponadto dwukrotnie pełnił funkcję sekretarza polsko-koreańskiej konferencji oraz był jurorem Ogólnopolskiej Olimpiady Wiedzy „Niskie emisje”.

W podsumowaniu pragnę stwierdzić, że opisane badania naukowe w cyklu 12 prac spełniają kryterium nowości naukowej wymaganej w procedurze habilitacyjnej. Całkowity dorobek naukowy dr Giełdonia na który składa się 39 publikacji oraz 57 prezentacji konferencyjnych uważam za znaczący. Działalność naukowa Kandydata znajdowała uznanie wyrażone 3 zespołowymi nagrodami Rektora Uniwersytetu Gdańskiego oraz nagrodą im. Andrzeja Wiśniewskiego i wyróżnienia w konkursie im. Mrongowiusza.

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 227 cytowań tych prac. Są one wynikiem współpracy dr Artura Giełdonia z licznymi zespołami doświadczalnymi nad bardzo szerokim spektrum zagadnień wykraczającym daleko poza obszar objęty rozprawą i dotyczyła m.in. rozwoju gruboziarnistych pól siłowych UNRES oraz modelowaniu właściwości cieczy

jonowych. Obiecujące wydają się plany badawcze Kandydata w zakresie implementacji łańcuchowego modelu Markowa celem identyfikacji ścieżki zwijania białek.

Reasumując stwierdzam, że dr Artur Giedroń posiada wymagany dorobek naukowy oraz wykazuje aktywność spełniającą podstawowe warunki stawiane habilitantom, zgodnie z Rozporządzeniem MNiSzW z dnia 1 września 2011 r. Wobec tego stawiam wniosek o dopuszczenie Kandydata do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

A handwritten signature in blue ink, consisting of several loops and a long horizontal stroke at the end, positioned below the text.