



Prof. dr hab. Krzysztof W. Wojciechowski  
**Instytut Fizyki Molekularnej  
Polskiej Akademii Nauk**

ul. M. Smoluchowskiego 17, 60-179 Poznań  
tel. 61 8695 260, fax 61 8684-524  
kww@ifmpan.poznan.pl

Poznań, 2024.09.30

## **Ocena zbioru publikacji *Wpływ nanostruktur na dwuwarstwę fosfolipidową* i dorobku naukowego dra Przemysława Raczyńskiego**

### ***Wprowadzenie***

**Doktor Przemysław Raczyński, zwany dalej Habilitantem**, rozpoczął studia na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Śląskiego (WMFiCh UŚ) w Katowicach. W roku 2000 uzyskał także licencjat z fizyki. W roku 2002 **ukończył studia magisterskie na kierunku Informatyka na Wydziale Techniki UŚ**. Na tym samym Wydziale, gdzie uzyskał licencjat, **Habilitant obronił w roku 2008, swoją rozprawę doktorską** pod tytułem: „*Badanie dynamiki cholesterolu w otoczeniu fosfolipidów i białek – symulacje komputerowe*” otrzymując stopień naukowy doktora nauk fizycznych. **Promotorem rozprawy był prof. dr hab. Zygmunt Gburski**. Po doktoracie, w latach 2010 – 2015, **Habilitant** pracował na stanowisku fizyka na WMFiCh UŚ, a potem, **od roku 2015 do chwili obecnej, jest adiunktem na Wydziale Nauk Ścisłych i Technicznych Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach**. W latach 2010-2018 był też nauczycielem Fizyki w II Liceum Ogólnokształcącym im. Marii Konopnickiej w Katowicach.

### ***Uwagi dotyczące zbioru publikacji stanowiących podstawę habilitacji***

Z dostarczonych mi materiałów wynika, że **Habilitant jest (współ)autorem 53 prac, z czego 33 opublikował po doktoracie**. **Podstawą habilitacji jest zbiór 13 publikacji naukowych** zatytułowany „*Wpływ nanostruktur na dwuwarstwę fosfolipidową*”. **9 z nich opublikowano w czasopiśmie naukowych o zasięgu światowym: 3 w Archives of Biochemistry and Biophysics (IF=3.9), 2 w Journal of Physical Chemistry C (IF=3.7), 1 w BBA-Biomembranes (IF=3.4), 1 w Computational Materials Science (IF=3.3), 1 w Journal of Physical Chemistry B (IF=3.3) i 1 w Sensors (IF=3.9), a 4 w materiałach konferencyjnych Springer Proceedings in Physics**. **Wśród tych ostatnich jedna jest monoautorskim dziełem Habilitanta. Pozostałe prace wchodzące w skład habilitacji są wieloautorskie**. Z załączonych do dokumentacji deklaracji dotyczących wkładu autorskiego wynika, że **Habilitant był jednym z pomysłodawców badań**. Był on też odpowiedzialny za opracowywanie modelu i przeprowadzanie symulacji komputerowych. Brał też udział w interpretacji, opracowaniu wyników oraz przygotowaniu manuskryptów publikacji. **W 12 pracach Habilitant jest pierwszym autorem, a w 11 pracach był autorem korespondującym**. **Wskazuje to na istotny wkład osobisty i wiodącą rolę Habilitanta w tychże badaniach**. Fakt ten potwierdzają załączone oświadczenia współautorów.

Publikacje stanowiące habilitację p. dra Przemysława Raczyńskiego dotyczą badań zachowań złożonych układów biomolekularnych i nanomolekularnych. Mówiąc bardziej precyzyjnie,

prace Habilitanta dotyczą ważnych i obecnie bardzo modnych zagadnień związanych, między innymi, z możliwościami zastosowania nanostruktur typu nanorurek, „nanopojemników” lub innych nanoobjektów do dostarczania pewnych substancji do wnętrza komórki lub usuwania takich substancji z komórki. Są to niewątpliwie cele ambitne i ciekawe, choć – moim zdaniem – od uzyskanych w habilitacji wyników do ich praktycznych zastosowań droga jest daleka.

Na marginesie pozwolę sobie w tym miejscu podkreślić, że wraz z niezwykle dynamicznym rozwojem komputerów symulacje komputerowe stają się coraz tańszym i łatwiejszym, a jednocześnie coraz bardziej efektywnym sposobem analizy procesów zachodzących w różnego rodzaju układach złożonych. Nie mam więc wątpliwości, że należy to podejście u nas zdecydowanie wspierać.

**Część publikacji składających się na habilitację [46,47,48,49] dotyczy badań oddziaływań pomiędzy klastrami molekuł cholesterolu w obecności wody jak i bez niej z nanorurkami węglowymi, węglowo-krzemowymi i zbudowanych z azotku boru. Pozostałe prace są związane z indentacją dwuwarstwy fosfolipidowej za pomocą różnych nanostruktur: nanorurek węglowych [37,38,50,51], węglowo-krzemowych [26,39], grafenu [34], a także nanostozka krzemowego [ABB]. Jedna z publikacji [Springer] dotyczy spontanicznej regeneracji dwuwarstwy fosfolipidowej po usunięciu z niej nanostruktury.** Zbiór prac stanowiących habilitację jest więc dość spójny tematycznie.

Na marginesie chciałbym tu podkreślić, że zastosowane przez Habilitanta oznaczenia prac stanowiących podstawę habilitacji są nie tylko dość niezwykle, ale i bardzo niewygodne dla czytelnika/recenzenta. Zwykle przyjmuje się dla tych prac odrębną numerację, która wyróżnia je zdecydowanie spośród pozostałych publikacji wchodzących do dorobku naukowego habilitantów. Wprawdzie wymaga to pewnego dodatkowego wysiłku od autorów, jednak – moim zdaniem – jest to dla nich zdecydowanie opłacalne, bo znacznie ułatwia to życie potencjalnym czytelnikom, a w szczególności recenzentom.

Większość badań opisanych w habilitacji wykonano za pomocą wielkoskalowych symulacji komputerowych. Badano układy złożone z około  $10^5$  atomów, co wymaga na tyle dużych mocy obliczeniowych, głównie czasu procesora (CPU), że możliwe jest praktycznie wyłącznie w centrach superkomputerowych, które – na szczęście – w Polsce istnieją, a Habilitant potrafi z nich skutecznie korzystać. Wykorzystano gotowe oprogramowanie NAMD (*Nanoscale Molecular Dynamics*), stworzone w USA. Oddziaływania międzyatomowe opisywane były za pomocą pola CHARMM (*Chemistry at HARvard Molecular Mechanics*) zaproponowanego także w USA.

Na marginesie pozwolę sobie zauważyć, że kiedyś dziwiło mnie niezmiernie, iż w dość sporym kraju europejskim, jakim jest Polska, a w dodatku aspirującym do znalezienia się w pierwszej dziesiątce na świecie w naukach ścisłych, chemicy i biochemicy nie dorobili się własnego oprogramowania. Obecnie przestałem się jednak temu dziwić, bo jeśli adiunkt zarabia zaledwie około półtora pensji minimalnej, a profesor tytularny otrzymuje za swą pracę mniej więcej dwie takie pensje, to któż, kiedy i po co miałby takie oprogramowanie stworzyć.

Ponieważ publikacje habilitacyjne opublikowano w recenzowanych czasopismach, nie widzę sensu omawiania poszczególnych prac. Ograniczę się do wypunktowania ich głównych wyników. Wyjątkiem będzie praca [49], której poświęcę więcej uwagi, bo jest to jedyna praca

indywidualna Habilitanta, a więc można na jej podstawie wyrobić sobie opinię na temat Jego samodzielności. Choć od opublikowania tej pracy upłynęło już blisko 5 lat, przez co przyjąć należy, że ocena ta dotyczy raczej dolnej granicy tejże samodzielności w chwili obecnej, to od niej jednak zacząć.

Praca "*Properties of Ultrathin Lipid Layers Surrounding Boron Nitride Nanotube: Computer Simulation Study*" została opublikowana przez wydawnictwo Springer International Publishing na stronach 399–408 w 2019 w tomie "*Nanophotonics, Nanooptics, Nanobiotechnology, and Their Applications*" i – jak wskazuje jej tytuł - dotyczy badania właściwości warstw cholesterolowych lub fosfolipidowych otaczających nanorurkę azotku boru (BNNT). Taki wybór nanorurki podyktowany był wynikami badań toksykologicznych, które wykazały, że BNNT wykazują większą biokompatybilność niż nanorurki węglowe lub węglowo-krzemowe. Za pomocą dynamiki molekularnej przeprowadzono dynamiczne i strukturalne obserwacje układu złożonego z nanorurki pokrytej przez  $n = 15$  i 30 cząsteczek cholesterolu lub 18 cząsteczek fosfolipidów, przy czym wiadomo, że 30 molekuł cholesterolu lub 18 fosfolipidów pokrywa całkowicie nanorurkę. Zbadano jakościowo zachowanie cząsteczek cholesterolu i fosfolipidów w różnych temperaturach. Pokazano chwilowe konfiguracje układu. Oszacowano współczynniki dyfuzji cholesterolu i fosfolipidów oraz ich parametry Lindemanna dla różnych temperatur. Wyznaczono też radialne funkcje rozkładu środków mas molekuł.

Choć praca ta wygląda poprawnie, to nasuwa mi się kilka uwag:

- Nie jest dla mnie jasne jakie są czasy charakterystyczne dla badanych procesów. Innymi słowy, nie znam odpowiedzi na pytanie, jak wyglądać będą wyniki dla symulacji dwukrotnie dłuższych/krótszych!
- Nie znam też odpowiedzi na pytanie: jak wyglądać będą wyniki dla symulacji dwukrotnie większych/mniejszych układów? Brakuje bowiem analizy dotyczącej rozmiaru układu.
- Nie wyjaśniono znaczenia słów „perpendicular boundary conditions (PBC)”. Domyślam się, że Habilitant wprowadził periodyczność w kierunku osi nanorurki, ale nie jest dla mnie jasne jakie są warunki brzegowe w pozostałych kierunkach.
- Nie jest jasne jak wygląda badany układ dla  $n$  pomiędzy 15 i 30, albo dla  $n > 30$  i jakie są jego właściwości.
- Na rysunku 26.3 trudno zauważyć części liniowe wykresów, z których wyznaczano współczynnik dyfuzji  $D$  pokazany na rys.26.4. Brak stosownego komentarza autora.
- W obecności wody cząstki cholesterolu dla  $n=30$  nie tylko nie wykazują mniejszej mobilności niż dla  $n=15$ , ale ich mobilność jest wyraźnie WIĘKSZA! Czytelnik chciałby zapewne dowiedzieć się dlaczego.
- W kontekście współczynnika Lindemanna można zauważyć, że szkoda, że nie badano wyższych temperatur w celu przybliżonej lokalizacji przejścia do fazy płynnej.
- Skrót nazwy dynamika molekularna pojawił się już we wstępie do pracy, ale wyjaśniony został dopiero w sekcji „materiały i metody”. Skrót POPC nie został wcale rozszyfrowany.
- Wystarczyło napisać, że na rys.26.2 jest to samo co na 26.1, ale widok z boku. W obecnej wersji czytelnik może zastanawiać się jak wygląda kwestia wody w przypadku b na rys.26.2.
- Wniosek, że uzyskane wyniki pokazują, iż ruchliwość i zdolność do reorientacji cząsteczek lipidów wzrasta wraz z ogrzewaniem układu trudno uznać za nieoczywisty.

Na marginesie wypada mi zauważyć, że niektóre z powyższych niedoskonałości, np. brak nawet pobieżnej analizy wpływu rozmiarów badanych układów na otrzymane wyniki, dotyczą nie tylko większości prac Habilitanta, ale stanowią denerwującą manierę bardzo

wielu autorów pracujących w dziedzinie. Jest to też trochę zabawne, bo autorom tym wydaje się często, że uzyskują wyniki ilościowe.

Główne wyniki zawarte w zbiorze prac wchodzących w skład habilitacji są wypunktowane poniżej, przy czym zaczynamy od badań oddziaływań pomiędzy klastrami molekuł cholesterolu, a kończymy na indentacji dwuwarstwy fosfolipidowej przez różne nanostruktury i ekstrakcji tychże z dwuwarstwy. .

- 1) Pokazano, że nanorurki węglowe i węglowo-krzemowe umożliwiają zmniejszenie domeny cholesterolu zlokalizowanej na powierzchni białka śródbłonna, a efektywność procesu ekstrakcji molekuł cholesterolu zależy od rodzaju i orientacji nanorurek, przy czym nanorurki węglowo-krzemowe są skuteczniejsze niż nanorurki węglowe [46].
- 2) Pokazano, że w układach składających się z cząsteczek cholesterolu i fosfolipidów pokrywających bardzo cienką warstwę nanorurki węglowe i węglowo-krzemowe: (a) cząsteczki cholesterolu i fosfolipidów wykazują większą mobilność bez obecności wody, (b) obecność nanorurki w układzie zmniejsza ruchliwość cholesterolu i fosfolipidów, (c) nanorurki węglowo-krzemowe bardziej zmniejszają ruchliwość lipidów, niż nanorurki węglowe [47].
- 3) Pokazano, że molekuły fosfolipidów otaczające nanorurkę azotku boru mają większą dynamikę translacyjną niż nanorurki węglowe i węglowo-krzemowe [48,49].
- 4) Pokazano, że zarówno nanorurka węglowa otwarta jak i zamknięta może przebić membranę bez znaczącego uszkodzenia dwuwarstwy fosfolipidowej, ale nanorurka zamknięta w mniejszym stopniu ingeruje w strukturę membrany [37].
- 5) Pokazano, że po przebiciu membrany fosfolipidowej przez nanorurkę węglową mogą przez nią migrować cząsteczki tlenu azotu, a po wyciągnięciu nanorurki następuje spontaniczne uszczelnienie dwuwarstwy fosfolipidowej, co wskazuje na możliwość dostarczenia tlenu azotu do komórek za pomocą nanorurek węglowych [50].
- 6) Wykonano symulacje komputerowe: (a) procesów przebicia dwuwarstwy fosfolipidowej przez nanorurki węglowe o różnych średnicach i z różnymi prędkościami, (b) procesów ekstrakcji takich nanorurek z dwuwarstwy fosfolipidowej. Pokazano, że przebicie nanorurką dwuwarstwy fosfolipidowej, a później ekstrakcja nanorurki nie prowadzi do znacznego/trwałego uszkodzenia membrany, ani do zmiany jej struktury. Badania te pokazały też, że indentacja błony przy użyciu nanorurki o większej średnicy wymaga zwykle większej siły [38,51].
- 7) Pokazano, że w przypadku nanoindentacji uszkodzenie membrany przez nanorurkę węglową jest niewielkie w procesach z małymi prędkościami wbijania. Natomiast przy wyciąganiu nanorurki jest odwrotnie – mniejsze uszkodzenia powstają przy większych szybkościach jej ekstrakcji. Zatem, żeby zminimalizować liczbę molekuł wyrwanych z błony należy ją przebijać powoli, ale indenter powinien być z niej usuwany z dużą prędkością [38]. Zastosowanie nanorurek węglowo-krzemowych prowadzi do jakościowo podobnych wniosków [26].
- 8) Wykonano symulacje procesów przebicia lub przecięcia dwuwarstwy fosfolipidowej pod różnymi kątami i pokazano, że odchylenie kąta nanorurki od pionu oraz zwiększenie prędkości nanoindentera wymaga przyłożenia większej siły dla pokonania oporu membrany [39]. Pokazano też, że gdy nanorurka porusza się wzdłuż swej osi, liczba wyrwanych lipidów jest mniejsza, niż gdy nachylona nanorurka przecina błonę poruszając się prostopadle do powierzchni warstwy. Wynika to z faktu, że w tym ostatnim przypadku nanorurka ma kontakt z większą ilością molekuł w błonie i przez to wrywa więcej cząsteczek. Warto tu

dodać, że porównanie nanorurek węglowych i węglowo-krzemowych, jest niekorzystnie dla tych ostatnich.

- 9) Wykonano symulacje procesu indentacji dwuwarstwy fosfolipidowej przy użyciu grafenu o różnych rozmiarach oraz symulacje procesu spontanicznej regeneracji membrany. Pokazano, że nawet w przypadku mocnego uszkodzenia dwuwarstwy fosfolipidowej poprzez cięcie grafenem, jest ona w stanie regenerować się w czasie rzędu  $10^2$  ns [34].
- 10) Wykonano szereg badań poświęconych wpływowi wprowadzania/wycofywania nanostożka krzemowego odpowiednio do/z dwuwarstwy fosfolipidowej. Pokazano, między innymi, że przy wycofywaniu nanostożka z małej głębokości początkowej liczba lipidów usuniętych z membrany jest istotnie (kilkukrotnie) mniejsza niż w przypadku znacznej głębokości początkowej nanostożka, a czas regeneracji dwuwarstwy fosfolipidowej wydłuża się wraz ze zwiększaniem początkowej głębokości nanostożka krzemowego [ABB].

Podsumowując powyższe uwagi sądzę, że p. dr Przemysław Raczyński uzyskał szereg ciekawych wyników dotyczących indentacji dwuwarstwy fosfolipidowej za pośrednictwem różnych nanostruktur. Niektóre z tych wyników mogą mieć nawet pewne znaczenie praktyczne w przyszłości.

#### **Uwagi na temat dorobku naukowego Habilitanta,**

Wg bazy Web of Science p. dr Przemysław Raczyński jest autorem lub współautorem 44 publikacji, z których 29 opublikował po doktoracie. 29 spośród prac Habilitanta zostało dotychczas zacytowane. Całkowita liczba tych cytatów to 230, co daje Habilitantowi indeks Hirscha (HI) równy 10. Warto zauważyć, że spośród wspomnianych cytatów 146 cytowań to nie są autocytyaty.

W bazie SCOPUS znalazłem 53 publikacje, z czego 35 prac ukazało się po uzyskaniu stopnia doktora. 33 prace zostały dotychczas zacytowane 263 razy, przy czym 154 razy bez autocytytów (BA), a 99 bez autocytytów współautorskich (BAW), co daje odpowiednio  $HI=11$ ,  $HI_{BA}=7$  i  $HI_{BAW}=5$ .

Znaczną część dorobku Habilitanta stanowią prace konferencyjne. Pozostałe prace, które nie weszły w skład habilitacji, zostały opublikowane w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym: *Biomolecular Engineering*, *International Journal of Molecular Sciences*, *Journal of Molecular Structure*, *Journal of Non-Crystalline Solids*, *Molecular Physics*, *Physical Review E*, *Reviews on Advanced Materials Science*, *Solid State Communications*. Tematyka tych publikacji jest dość bliska habilitacji i dotyczy symulacji komputerowych oddziaływania układów biologicznych z wybranymi nanostukturami.

Po uzyskaniu stopnia doktora, p. dr Przemysław Raczyński wygłosił 5 wykładów na konferencjach krajowych i międzynarodowych, z czego jeden wykład był na zaproszenie, a także 8 razy prezentował wyniki swoich badań w postaci plakatów.

W dostarczonym mi materiale nie znalazłem informacji dotyczących długoterminowych bądź średnioterminowych wyjazdów zagranicznych Habilitanta. W macierzystej uczelni Habilitant współpracował z prof. drem hab. Z. Gburskim i drem hab. Z. Dendzikiem. Współpracę krajową nawiązał też z drem P. Bełdowskim z Politechniki Bydgoskiej. Niektóre publikacje cyklu habilitacyjnego powstały we współpracy międzynarodowej, np. z prof. J. Samiosem z Uniwersytetu w Atenach w Grecji, z prof. T. Poschelem z Uniwersytetu Fryderyka Aleksandra w Erlangen i Norymberdze w Niemczech.

Dr Przemysław Raczyński dwukrotnie wnioskował o finansowanie badań naukowych w konkursach krajowych, ale wnioski te nie były skuteczne.

Przedstawiona dokumentacja wskazuje, że p. dr Raczyński zrecenzował przynajmniej 6 prac: 3 dla *Journal of Physical Chemistry* i po jednej dla *Archives of Biochemistry and Biophysics*, *Chemical Physics Letters* i *Molecular Simulation*.

### **Uwagi na temat osiągnięć dydaktycznych Habilitanta**

Pan dr Przemysław Raczyński ma spore doświadczenie dydaktyczne:

- prowadził zajęcia z 9 przedmiotów ze studentami na kierunkach Informatyka Stosowana i Fizyka Medyczna,
- był recenzentem 6 prac inżynierskich,
- wielokrotnie występował w roli członka komisji do przeprowadzenia egzaminu i obrony prac dyplomowych inżynierskich,
- pełnił rolę promotora pomocniczego w zakończonym obroną w roku 2023 przewodzie doktorskim p. Mateusza Pabiszczaka.

Jak wspomniano na początku niniejszej recenzji, w latach 2010-2018 Habilitant był też nauczycielem Fizyki w II Liceum Ogólnokształcącym im. Marii Konopnickiej w Katowicach.

### **Uwagi na temat działań organizacyjnych Habilitanta**

Habilitant był:

- sekretarzem komisji rekrutacyjnej na kierunku Informatyka Stosowana,
- dwukrotnie był przewodniczącym komisji rekrutacyjnej na kierunku Informatyka Stosowana
- administratorem systemów informatycznych na wydziale/w instytucie,
- a obecnie jest opiekunem roku na kierunku Informatyka Stosowana.

Warto wspomnieć, że gdy w latach 2010-2018 Habilitant był nauczycielem fizyki, to brał również udział w popularyzacji tej dziedziny nauki organizując rozmaite wydarzenia w szkole i poza nią.

Dla porządku wspomnę też, że Habilitant jest członkiem Polskiego Towarzystwa Fizycznego.

### **Podsumowanie i wniosek**

Aktywność naukową oraz dorobek organizacyjny i dydaktyczny p. dra Przemysława Raczyńskiego oceniam zdecydowanie pozytywnie. Sądzę też, że wkład jaki wniósł w rozwój dyscypliny nauki fizyczne spełnia wymogi ustawowe stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego.

Wobec powyższego wnioskuję o dopuszczenie p. dra Przemysława Raczyńskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.



Prof. dr hab. Krzysztof Witold Wojciechowski