

Prof. dr hab. Mirosław R. Dudek
Uniwersytet Zielonogórski
Instytut Fizyki
ul. Szafrana 4a, 65-069 Zielona Góra

Zielona Góra, 21.04.2024.

M.Dudek@if.uz.zgora.pl

Ocena osiągnięcia naukowego i dorobku naukowego dr. Przemysława Raczyńskiego w ramach postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego

Pracę doktorską zatytułowaną „*Badanie dynamiki cholesterolu w otoczeniu fosfolipidów i białek – symulacje komputerowe*” dr. Przemysław Raczyński obronił w 2008 roku i uzyskał stopień naukowy doktora nauk fizycznych w zakresie fizyki na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach. Promotorem w przewodzie doktorskim był prof. dr hab. Zygmunt Gburski. Deklarowany dorobek publikacyjny dr. Przemysława Raczyńskiego w czasopismach naukowych w okresie do doktoratu włącznie stanowi 15 publikacji. Postępowanie o nadanie dr. Przemysławowi Raczyńskiemu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauk fizycznych zostało wszczęte w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach 30 stycznia 2024 roku. W materiałach przesłanych do recenzji załączone zostały wszystkie wymagane ustawowo dokumenty, które podlegają ocenie.

Ocena osiągnięcia naukowego „*Wpływ nanostruktur na dwuwarstwą fosfolipidową*”

Jako osiągnięcie naukowe dr. Przemysław Raczyński przedstawił wyniki badawcze z cyklu 11 publikacji i dwóch manuskryptów. W okresie złożenia wniosku, jeden z manuskryptów był przyjęty do publikacji a drugi w trakcie recenzji. Osiągnięcie naukowe zatytułowane zostało „*Wpływ nanostruktur na dwuwarstwą fosfolipidową*”. Cztery z publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe są rozdziałami w proceedingsach konferencji naukowych. Ponieważ obydwie manuskrypty z deklarowanego przez Autora osiągnięcia naukowego zostały opublikowane, jedna praca w proceedingsach konferencyjnych i jedna praca w czasopiśmie Archives of Biochemistry and Biophysics, to tym samym oceniane wyniki badawcze dotyczą 13 publikacji.

Publikacje w wykazie publikacji dla osiągnięcia naukowego oznaczone zostały przez Autora bulletami co utrudnia szybkie odwoływanie się do nich. Publikacje odnoszące się do osiągnięcia naukowego są zarówno na liście w czasopismach naukowych i liście rozdziałów w monografiach, którymi są proceedingsy Springer. Na liście publikacji deklarowanych w ramach osiągnięcia naukowego dr. Przemysław Raczyński jest wszędzie pierwszym autorem poza jedną publikacją, gdzie jest drugim autorem. W dziesięciu pracach z osiągnięcia naukowego dr. Przemysław Raczyński pełni rolę „corresponding author”.

Przedstawiony cykl prac jest kontynuacją tematyki badawczej z rozprawy doktorskiej. W omówieniu osiągnięcia naukowego dr. Przemysław Raczyński napisał wyjaśnienie, że „*Wtedy, przy ograniczonej mocy obliczeniowej symulowane były układy bezwodne, a symulacje nie zawsze były w pełni atomistyczne. Dodatkowo użyty został model molekuly sztywnej.*” Prace przedstawione w osiągnięciu naukowym są pracami teoretycznymi o charakterze symulacji komputerowych metodą dynamiki molekularnej i metod z nią związanych. W paru miejscach autoreferatu Autor podkreślił, że opracowane nowe metody symulacji komputerowych są w pełni atomistyczne. Tym samym oznacza to, że w okresie po doktoracie opracowane zostały nowe algorytmy numeryczne i zmienione zostało oprogramowanie. Ponieważ jednak prace są wieloautorskie, we współpracującej ze sobą grupie, gdzie publikowane są wyniki prac badawczych korzystające z analogicznych metod symulacyjnych na przykład dotyczących modelowania nanorurek węglowych przez innych uczestników grupy, to nie jest dla mnie oczywiste które rodzaje oprogramowania są

autorskie, które metody numeryczne są opracowane lub przystosowane przez dr. Przemysława Raczyńskiego do warunków doświadczenia komputerowego. Nie ma tych informacji podanych w autoreferacie. W pracach są podane tylko ogólnie znane nazwy specjalistycznych pakietów symulacyjnych. Jednocześnie bardzo wysoko oceniam poziom techniczny przeprowadzonych symulacji komputerowych w przedstawionych pracach i olbrzymią wiedzę niezbędną do prowadzenia tego typu symulacji. Jeśli chodzi o, pozwolę sobie zacytować, „atomistyczne” symulacje to mogą one być wzorcem dla innych chcących korzystać z metod dynamiki molekularnej dla podobnego charakteru modelowania innych złożonych układów molekularnych. Przedstawione badania, w dużej części dotyczą indentacji dwuwarstwy fosfolipidowej przez nanorurkę węglową, krzemowo-węglową lub grafen, gdzie Autor pokazał mechanizm takiego zjawiska na poziomie molekularnym. Podobnie jest z uwzględnieniem interakcji nanorurek z cholesterolem czy użyciem innych nanostruktur do indentacji czy przecinania warstwy fosfolipidowej. Brakuje mi jednak w dyskusji otrzymanych wyników szerszego nawiązania do właściwości fizykochemicznych symulowanych materiałów w roztworach wodnych, możliwości funkcjonalizowania powierzchni nanorurek węglowych, w tym informacji dotyczących punktu zerowego (PZC) nanorurek, czy białek, ich potencjał zeta, itd. Te ostatnie parametry fizykochemiczne pozwoliłyby przynajmniej wstępnie określić relacje związane z pojawianiem się ładunku elektrycznego na powierzchniach takich materiałów. Byłaby wtedy też możliwość przeprowadzenia eksperymentów testujących symulacje komputerowe i dokonania ewentualnej korekty modeli atomistycznych. Interesujące dla zbadania są też właściwości mechaniczne w skali nanometrowej badanych układów z powodu dużej różnicy wartości modułu Younga pomiędzy jednościenneymi nanorurkami węglowymi i wielościenneymi. W tym przypadku Autor skoncentrował się tylko na średnicy nanorurek.

Dr. Przemysław Raczyński załączył wydruki publikacji dotyczących osiągnięcia naukowego w osobnym zeszycie w kolejności wziętej z bibliografii: [46],[47],[49],[48],[37],[50],[51],[38],[26],[39],[34],[ABB],[SPRINGER]. Cel podjętych badań dotyczy potencjalnego zastosowania nanomateriałów węglowych (CNT, SiCNT, grafen i inne) w biologii i medycynie. Pytania, które są stawiane są z zakresu potencjalnych zastosowań dla możliwości usuwania cholesterolu, zastosowań dla celowego dostarczania różnych substancji do wnętrza komórki, celowanej terapii dla onkologii, oraz nanosensorów. Uzyskane wyniki badawcze dotyczą głównie mechanizmu przebicia błony komórkowej i jednocześnie możliwości transportu materiału przy pomocy nanorurek przy zachowaniu stabilności komórki. Jest to bardzo wartościowy początek badań w tym zakresie pokazujący mechanizm pokonania błony komórkowej na poziomie molekularnym. Otrzymane wyniki badawcze pozwalają już myśleć o zastosowaniach. W kolejnych, przyszłych etapach prac badawczych sugerowałbym współpracę z grupami przeprowadzającymi eksperymenty.

Opublikowane prace kolejno dotyczą:

[46] pokazanie możliwości adsorpcji klastra cholesterolu umieszczonego na powierzchni białka przez dwa rodzaje nanorurek CNT i SiCNT.

[47] zbadanie różnic we właściwościach adsorpcyjnych dla cienkich warstw cholesterolu i cienkiej warstwy fosfolipidowej umieszczonej na nanorurkach CNT oraz SiCNT oraz zbadanie dynamiki translacyjnej osadzonego materiału w warunkach z obecnością wody i bez niej.

[49] badania podobne jak w publikacji [47] ale dla nanorurek BNNT (nanorurka z azotku boru). Wyniki dla dynamiki translacyjnej porównane zostały z przypadkiem dla CNT i SiCNT.

[48] przeprowadzono badania dynamiki małych układów zbudowanych z samych cholesteroli, bez nanorurek w obecności wody i bez niej. Praca ma ciekawy charakter poznawczy związany z rolą obecności molekuł wody na dynamikę cholesterolu.

[37] otwiera cykl prac związanych z indentacją podwójnej warstwy fosfolipidowej przy pomocy CNT. Oszacowane zostały siły niezbędne do przebicia takiej warstwy oraz zbadane zostały właściwości użycia do tego celu nanorurek otwartych i zamkniętych.

[50] ciekawa praca gdzie do indentacji podwójnej warstwy fosfolipidowej użyto jednostronnie zamkniętej CNT wypełnionej molekułami tlenu azotu. W pracy pokazano, że molekuly tlenu azotu mogą opuszczać nanorurkę.

[51] i [38] zbadano wpływ średnicy CNT w procesie indentacji i wysuwania CNT z pojedynczej warstwy zbudowanej z fosfolipidów i białek na stabilność tej warstwy.

[26] porównanie wyników dla nanorurki krzemowo-węglowej z przypadkiem [38].

[39] sprawdzone zostały właściwości indentacji dla błony lipidowej dla nanorurek CNT i SiCNT skierowanej pod różnymi kątami względem błony.

[34] zbadano użycie grafenu do nanoindentacji warstw lipidowych. Symulacje sugerują ciekawą właściwość tego typu materiału, ponieważ cięcie warstwy lipidowej grafenem pozwala na regenerację warstwy.

[ABB] zbadana została rola kształtu nanostruktury do indentacji, gdzie do indentacji użyto nanostózka. Dr. Przemysław Raczyński nawiązuje też do sond z mikroskopu sił atomowych (AFM). Dodalbym, że AFM miałby duże możliwości eksperymentalnego potwierdzenia wyników uzyskanych przez dr. Przemysława Raczyńskiego i jego współautorów, również tych wcześniejszych. Ta aparatura posiada możliwość użycia sondy mikroskopu do spektroskopii siłowej i pozwala na zmierzenie sił oddziaływania sondy z badanym materiałem. Można wręcz wykonać całą mapę indentacji. Umieszczenie nanorurki (lub nanostózka) jako sondę na belce jest sprawą techniczną. Dodam, że ciekawym materiałem mogą też być nanorurki TiO₂ uzyskiwane metodą hydrotermalną, które w przeciwieństwie do CNT kształtem przypominają zwinięty rulon i dla ściskania/rozciągania poprzecznie do osi nanorurki mają prawie idealny współczynnik Poissona -1. Dawaloby to dodatkowe możliwości dla indentacji warstw fosfolipidowych ale też transferu różnych materiałów przy pomocy takiej nanorurki. Dodatkowo nie są one poskręcane.

[SPRINGER] jest to ostatnia praca w cyklu prac osiągnięcia naukowego i pokazany w niej jest proces samoregeneracji dwuwarstwy fosfolipidowej po wycofaniu z niej różnych nanostruktur (CNT, SiCNT, grafen, nanostozek).

Przedstawiony cykl publikacji będący podstawą osiągnięcia naukowego wskazuje na tematyczną spójność badań i konsekwencję do uzyskania celu jakim jest pokazanie możliwości użycia nanorurek węglowych i innych nanomaterialów do wprowadzania i wyprowadzania różnych materiałów z komórki. Dalszy postęp badań w tej tematyce wymaga jednak współpracy z doświadczalnikami. Zastrzeżenia też mam do sposobu przedstawienia wyników osiągnięcia naukowego. Dr. Przemysław Raczyński zamiast omawiać znaczenie wyników przedstawianych na kolejnych rysunkach powinien w bardziej wyrazisty przedstawić swoje osiągnięcie naukowe, dlaczego jest ono ważne naukowo, jaki jest wkład merytoryczny w uzyskanie tego wyniku itd.

Ocena dorobku naukowego, organizacyjnego i dydaktycznego.

Zliczyłem, że po doktoracie, jest 19 publikacji w czasopismach naukowych. Wszystkie one mają współautorów. Dodatkowo, jest 16 opublikowanych rozdziałów w monografiach/proceedingsach konferencyjnych, gdzie w jednym przypadku dr. Przemysław Raczyński jest jedynym autorem. Do doktoratu ukazało się 15 publikacji w czasopismach naukowych. W Autoreferacie jest informacja o 33 publikacjach

ponieważ do statystyki nie zostały wliczone manuskrypty, które zostały uwzględnione w osiągnięciu naukowym i zostały opublikowane jeszcze w 2023 roku. Biorąc pod uwagę okres 15 lat po doktoracie średnia liczba publikacji na rok wynosi ponad 2 prace na rok (dokładniej 2,3). Deklarowany sumaryczny impact factor dla czasopism w których są opublikowane prace wynosi 50,6, co oznacza średnio impact factor 3,37 na rok.

Deklarowana liczba cytowań publikacji dr. Przemysława Raczyńskiego wyniosła wg bazy Web of Science 218, w tym 140 bez autocytowań. Indeks Hirscha wg tej samej bazy wynosi 9.

Te dane indeksowe wnioskodawcy są przyzwoite.

Dr. Przemysław Raczyński wykazuje umiarkowaną ale akceptowalną aktywność konferencyjną. Co jest ważne, ma w dorobku trzy wykłady plenarne, w tym jeden jest na zaproszenie. Jest członkiem Polskiego Towarzystwa Naukowego. Dr. Przemysław Raczyński nie podał dokładnej liczby recenzowanych przez niego prac w czasopismach naukowych ale wymienił cztery bardzo dobre czasopisma, w których był recenzentem. Próbuje wysyłać wnioski grantowe (Iuventus Plus 2012, OPUS 2018). Jest beneficjentem czterech grantów obliczeniowych na superkomputerze, Nie zauważyłem staży w instytucjach zagranicznych, postdoców itp. W Autoreferacie podane są natomiast liczne kontakty naukowe z osobami prowadzącymi badania naukowe w dziedzinie symulacji komputerowych, w tym prof. Jannisem Samiosem (indeks Hirscha 26) i prof. Thortem Poschelem (indeks Hirscha 51).

Dr. Przemysław Raczyński pełnił funkcję promotora pomocniczego mgra Mateusza Pabiszczaka przy rozprawie doktorskiej zatytułowanej "Napełnianie bioagregatów fosfolipidowych substancjami polarnymi i niepolarnymi – symulacje komputerowe". Nie zauważyłem w danych pełnienia funkcji promotora na poziomie studiów licencjackich/inżynierskich i magisterskich. Jeśli chodzi o zajęcia dydaktyczne, to prowadził zajęcia laboratoryjne ze studentami kierunków Informatyka Stosowana oraz Fizyka Medyczna, i były to przedmioty, które nazwałbym przedmiotami komputerowymi (Algorytmy i programowanie, Architektura komputerów, Grafika inżynierska, Kurs C, Programowanie, Systemy wbudowane, Użytkowanie oprogramowania inżynierskiego, Wstęp do informatyki). Przydałyby się przedmioty z fizyki. Dr. Przemysław Raczyński był recenzentem kilku prac inżynierskich. Należy też nadmienić, że dr. Przemysław Raczyński w latach 2010-2018 był czynnym nauczycielem Fizyki w II Liceum Ogólnokształcącym. Ma on też w dorobku bogatą działalność organizacyjną na uczelni.

Oceniając tą część aktywności naukowej dr. Przemysława Raczyńskiego daje się zauważyć duże zaangażowanie w prowadzenie badań naukowych, ich popularyzację, a jednocześnie podejmuje on różne samodzielne próby poszerzenia warsztatu badawczego.

Pomimo uwag, uważam że przedstawiony do oceny cykl powiązanych tematycznie publikacji jest istotnym wkładem w rozwój dyscypliny nauki fizyczne. Osiągnięcie naukowe dr. Przemysława Raczyńskiego spełnia ustawowe wymagania stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Wnioskuje o dopuszczenie dr. Przemysława Raczyńskiego do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Mirostaw Dudzik