

Prof. dr hab. Artur Michalak  
Zakład Chemii Teoretycznej  
Wydział Chemii  
Uniwersytet Jagielloński  
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków  
tel. +48-12-686-2381  
fax. +48-12-686-2750  
e-mail: [michalak@chemia.uj.edu.pl](mailto:michalak@chemia.uj.edu.pl)



UNIWERSYTET  
JAGIELLOŃSKI  
W KRAKOWIE

Kraków, 9 maja 2024 r.

**Ocena dorobku naukowego dr Emilii Lubeckiej oraz jej osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego, przedstawionego pod tytułem**  
**„Opracowanie nowych metod w modelowaniu struktury i oddziaływań biomolekuł na różnych poziomach rozdzielczości”**

Wydział Chemii

**Dr Emilia Lubecka ukończyła studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego w 2008 r., uzyskując tytuł magistra ochrony środowiska;** temat pracy magisterskiej wykonanej pod opieką dr Jolanty Kumirskiej w katedrze Analizy Środowiska brzmiał „*Określenie wybranych elementów struktury pierwszorzędowej antygeny somatycznego bakterii Salmonella Telaviv*”. Warto podkreślić, że wyniki badań do pracy magisterskiej stały się podstawą dwóch publikacji naukowych. Po ukończeniu studiów magisterskich Kandydatka rozpoczęła studia doktoranckie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego oraz – równolegle – studia inżynierskie na kierunku *Informatyka* prowadzonym przez Wydział Elektroniki, Telekomunikacji i Informatyki Politechniki Gdańskiej. **W 2013 r. uzyskała tytuł inżyniera informatyki. Rozprawę doktorską** zatytułowaną „*1D-4D NMR w analizie struktury i konformacji biomolekuł: od analogów wazopresyny do drugiej cysteinowej pół-domeny katalitycznej enzymu E1 aktywującego ubikwitynę*” **obroniła w 2014 r. uzyskując stopień naukowy doktora nauk chemicznych;** promotorem był prof. dr hab. Jerzy Ciarkowski.

**Bogata kariera zawodowa i naukowa po zakończeniu doktoratu** przebiegała ścieżką interdyscyplinarną na pograniczu chemii teoretycznej, informatyki, biochemii i biofizyki. Bezpośrednio po studiach doktoranckich przez okres kilkunastu miesięcy (2014-2015) dr Emilia Lubecka zatrudniona była jako specjalista analityk w projekcie PI-Grid NG w Centrum Informatycznym

ul. Gronostajowa 2  
30-387 Kraków  
tel. +48 12 686 26 00  
fax +48 12 686 27 50  
[sekretar@chemia.uj.edu.pl](mailto:sekretar@chemia.uj.edu.pl)  
[www.chemia.uj.edu.pl](http://www.chemia.uj.edu.pl)

Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej na Politechnice Gdańskiej. W l. 2015-2020 zatrudniona była jako adiunkt naukowo-dydaktyczny w Instytucie Informatyki, na Wydziale Matematyki, Fizyki i Informatyki Uniwersytetu Gdańskiego. W l. 2022-2023 pracowała przez 9 miesięcy jako post-doc w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie w ramach projektu PathoGelTrap (program Horyzont 2020), a od października 2020 r. jest zatrudniona jako adiunkt badawczo-dydaktyczny na Wydziale Elektroniki, Telekomunikacji i Informatyki Politechniki Gdańskiej.

**Z uznaniem należy podkreślić także, że Habilitantka odbyła także kilka staży zagranicznych;** przed doktoratem dwa staże w Slovenian NMR Centre, National Institute of Chemistry (Lublana, Słowenia) - 4 miesiące w 2011 r. oraz 3 miesiące w 2012 r., a po doktoracie na Wydziale Chemii i Biochemii Uniwersytetu Oklahomy (Norman, OK, USA) w grupie prof. U.H.E. Hansmanna – 3 miesiące w 2019 r. Ponieważ wszystkie etapy zatrudnienia oraz staże krajowe i zagraniczne związane były z działalnością naukową, której wynikiem było powstanie wielu publikacji naukowych, można uznać, że **przesłanka ustawową zawartą w art. 219 ust. 1 pkt. 3** związana z „istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej lub instytucji kultury” w **przypadku dr Emilli Lubeckiej spełniona jest z nawiązką.**

**Osiągnięcia habilitacyjne dr Emilii Lubeckiej, zatytułowane „Opracowanie nowych metod w modelowaniu struktury i oddziaływań biomolekuł na różnych poziomach rozdzielczości”, stanowi cykl 12 publikacji naukowych opublikowanych w latach 2015-2023 w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym: *Journal of Computational Chemistry* (4 prace), *Journal of Physical Chemistry B*, *Journal of Chemical Physics*, *Biopolymers*, *Biopolymers (Peptide Science)*, *Frontiers in Molecular Biosciences*, *European Biophysics Journal* oraz czasopismach o profilu związanym z obliczeniami na komputerach dużej mocy: *TASK Quarterly* oraz *Supercomputing Frontiers*. W przedłożonym Autoreferacie prace zostały podsumowane 20-stronicowym komentarzem.**

**Wszystkie publikacje cyklu habilitacyjnego to prace wieloautorskie, przy czym w 5 pracach lista autorów obejmuje tylko dr Emilię Lubecką oraz prof. dr hab. Adama Liwo. W 9 publikacjach Habilitantka jest pierwszym autorem, a w 8 - autorem korespondencyjnym.** Przedłożona dokumentacja zawiera oświadczenia Habilitantki oraz współautorów dotyczące ich wkładu w pozostałe prace cyklu habilitacyjnego. **Oświadczenia te zdecydowanie pozwalają zidentyfikować wkład Habilitantki we wszystkich publikacjach; jest on związany przede wszystkim z rozwojem metodologii symulacji teoretycznych oraz ich zastosowaniami. Osiągnięcie Habilitantki stanowi zatem dobrze zdefiniowany, wydzielony zbiór zagadnień.**

Zasadniczy nacisk w osiągnięciu habilitacyjnym dr Emili Lubeckiej położony jest na rozwój metod do symulacji gruboziarnistych, choć dwie pierwsze prace cyklu habilitacyjnego [H1,H2] dotyczą

symulacji z zastosowaniem klasycznych, pełnoatomowych pól siłowych. W tych dwóch pracach obok wyników doświadczalnych uzyskanych przez współautorów przedstawione są wyniki symulacji dynamiki molekularnej przeprowadzonych przez Habilitantkę w podejściu pełnoatomowym (pole siłowe AMBER) mające na celu analizę struktury czterech agonistów antydiuretycznych: argininowej wazopresyny, deamino-wazopresyny (dAVP), [D-Arg8]-VP (DAVP) i desmopresyny (dDAVP), oraz ich *inverso* analogów. Wyniki te umożliwiły określenie czynników strukturalnych wpływających na efektywność i selektywność desmopresyny jako agonisty receptora antydiuretycznego. Jednocześnie, w pracach tych Habilitantka pokazała, że uwzględnienie w symulacjach środowiska ma bardzo istotny wpływ na strukturę przyjmowaną przez badane układy molekularne. Teza ta została później potwierdzona w pracy [H9] badaniach wpływu RNA na strukturę białka prionowego oparciu o wyniki symulacji MD z zastosowaniem pola siłowego UNRES/NARES-2P w reprezentacji gruboziarnistej.

Prace [H3], [H5] oraz [H12] dotyczą optymalizacji algorytmów oraz kodu pakietu UNRES mające na celu umożliwienie prowadzenie symulacji dłuższych oraz analizy większych układów molekularnych. W szczególności, stworzone zostało całkowicie nowe oprogramowanie poprzez unifikację i modularyzację kodu związaną z przepisaniem całości z Fortranu77 na Fortran90. Habilitantka dokonała także istotnych optymalizacji zrównoleglenia kodu pakietu. **Osobiście, szczególnie doceniam ten aspekt pracy dr Emilii Lubeckiej i bardzo mnie cieszy, że w naszym kraju zdarzają się ciągle habilitacje zawierające tego typu, wysoce specjalistyczne, ale także bardzo niewdzięczne prace metodologiczne.** Jest to tematyka bardzo niewdzięczna, gdyż nie daje możliwości publikacji w najwyżej punktowanych czasopismach o tematyce interesującej dla szerokiego grona odbiorców. Poza tym z wyników tego typu prac bardzo często korzystają użytkownicy oprogramowania, którzy często nie zdają sobie sprawy, że tylko dzięki takim „technicznym” pracom wykonalne są obliczenia do bardzo dużych układów z wykorzystaniem wielu procesorów/rdzeni na komputerach dużej mocy. Niestety, najczęściej nie jest to jednak także odzwierciedlane adekwatną liczbą cytowań, gdyż szczegółowych rozwiązań zaimplementowanych w stosowanych programach zwykle się nie cytuje. W tym kontekście praca [H12] opublikowana w *Journal of Computational Chemistry* daje szansę na „wynagrodzenie” Autorce wielkiego wkładu pracy poprzez cytowania w przyszłości.

Prace [H6], [H8], [H10] i [H11] **przedstawiają istotne z punkty widzenia metodologicznego wyniki badań Habilitantki związane są z optymalizacją wykorzystania więzów** pochodzących z kontaktów międzyresztowych oraz wprowadzenie więzów na odległości z danych NMR do pola siłowego UNRES.

Ostatnia grupa publikacji cyklu habilitacyjnego ([H4], [H7], [H9]) dr Emilii Lubeckiej dotyczy **rozwoju metodologii związanej z polami siłowymi dla kwasów nukleinowych NARES-2P oraz polisacharydów SUGRES-1P. Bardzo spektakularnym przykładem zastosowania tych metod jest praca [H9] przedstawiająca wykorzystanie gruboziarnistego pola siłowego do analizy przemian**

**konformacyjnych ludzkiego białka prionowego**, w której wykorzystane są wkłady do funkcji energii potencjalnej pochodzące z pola siłowego UNRES do modelowania białek, z pola siłowego NARES do modelowania kwasów nukleinowych, jak również wkłady z oddziaływań pomiędzy podukładami białkowymi i nukleinowymi (NARES/UNRES).

**Podsumowany w dokumentacji całkowity dorobek naukowy dr Emilii Lubeckiej obejmuje 34 publikacje naukowe, z których 8 zostało opublikowanych przed doktoratem; zatem poza publikacjami wchodzącymi w skład cyklu habilitacyjnego, dorobek naukowy Habilitantki obejmuje jeszcze 14 innych prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora. Łączna wartość współczynnika oddziaływania (*Impact factor*) prac Habilitantki po doktoracie wynosi ok. 66. Biorąc pod uwagę liczbę publikacji i rangę czasopism, całkowity dorobek Habilitantki uważam za bardzo dobry, na etapie habilitacji.**

**Wyniki badań naukowych prowadzonych przez dr Emilię Lubecką znajdują oddźwięk w literaturze. Zgodnie z dokumentacją, łączna liczba cytowań w zależności od bazy waha się pomiędzy 287 a 453, a indeks Hirscha pomiędzy 9 a 11. Biorąc pod uwagę specyfikę tematyki badawczej Habilitantki ukierunkowanej na rozwój metodologii teoretycznych są to liczby znaczące i można spodziewać się będą dość szybko rosnąć w bliskiej przyszłości, wraz z rosnącą liczbą badaczy wykorzystujących rozwijane metody i oprogramowanie.**

**Dorobek naukowy dr Emilii Lubeckiej obejmuje także współautorstwo wielu wystąpień konferencyjnych; w dokumentacji wymieniono 43 wystąpienia (w tym 32 na konferencjach międzynarodowych), z wyraźnym zaznaczeniem tych, które Habilitantka prezentowała osobiście (łącznie 22, w tym 5 prezentacji ustnych). W dokumentacji wymieniony jest jeden wykład wygłoszony na zaproszenie organizatorów konferencji międzynarodowej oraz jeden wykład na zaproszenie w ośrodku naukowym w USA.**

**Dr Emilia Lubecka uczestniczyła jako wykonawca w kilku projektach kierowanych przez osoby pod opieką których pracowała. W okresie doktoratu kierowała własnym projektem NCN PRELUDIUM.**

W dokumentacji habilitacyjnej wspomniany jest także fakt pełnienia (od 2023 r.) funkcji *Review Editor* w czasopiśmie *Frontiers in Molecular Biosciences*, jakoś świadczący o rozpoznawalności Habilitantki, choć nie jestem w pełni przekonany, że jest to znaczący element życiorysu naukowego, biorąc pod uwagę fakt, że na stronach internetowych tego czasopisma wspomina się o 4930 opublikowanych artykułach, a jednocześnie liczba różnej rangi edytorów wynosi 6113... (dane ze stron <https://www.frontiersin.org/journals/molecular-biosciences/articles> oraz <https://www.frontiersin.org/journals/molecular-biosciences/editors>, dostęp 9.05.2024 r.).

**Dorobek dydaktyczny dr Emilii Lubeckiej jest bardzo bogaty, i obejmuje prowadzenie różnych typów zajęć dydaktycznych w języku polskim i angielskim, w tym także wielu wykładów. Najistotniejszym elementem osiągnięć dydaktycznych ważnych u progu pełnej samodzielności oraz uzyskania prawa do prowadzenia doktoratów jest opieka nad studentami i doktoratami. Habilitantka była do tej pory opiekunem 34 studentów wykonujących prace licencjackie, a aktualnie sprawuje opiekę nad dwójką magistrantów.**

**Podsumowując, uważam, że przedstawione jako podstawa osiągnięcia habilitacyjnego prace dr Emilii Lubeckiej stanowią wkład w rozwój nauki. Podobnie należy ocenić jej inne prace opublikowane po doktoracie, które nie zostały umieszczone w cyklu habilitacyjnym. Aktywność naukowa Habilitantki, jak również jej aktywność dydaktyczna, świadczą pozytywnie o jego wysokich kwalifikacjach do samodzielnej pracy naukowo-badawczej. W mojej opinii spełnione są wszystkie przesłanki wymienione w Art. 219 aktualnie obowiązującej ustawy, wymagane do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego. Uważam więc także, że nadanie pani dr Emilii Lubeckiej stopnia doktora habilitowanego jest w pełni uzasadnione.**

Prof. dr hab. Artur Michalak