



UNIwersytet GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

Gdańsk, 1 czerwca 2019 r.

Opinia o osiągnięciach naukowych dra Artura Giędoń w związku z postępowaniem o nadanie Mu stopnia doktora habilitowanego

Niniejszą opinię sporządziłem na wniosek Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów, która działając w oparciu o art. 18a ust. 5 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytułach naukowych oraz o stopniach i tytułach w zakresie sztuki (Dz.U. z 2017 r. poz. 1789) powołała dnia 4 kwietnia 2019 r. komisję habilitacyjną, wyznaczając mi rolę recenzenta.

W roku 1999 dr Artur Giędoń otrzymał tytuł zawodowy magistra, broniąc na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego (UG) pracę magisterską zatytułowaną „Modelowanie molekularne oddziaływań receptora V2 i jego oddziaływań z bioligandami”. W roku 2001 zatrudnił się jako technik w Ośrodku Informatycznym UG, a w latach 2000-2004 był prawdopodobnie uczestnikiem studiów doktoranckich (brak informacji o zatrudnieniu w tym okresie oraz fakt uzyskania stopnia doktora w 2004 r. każą przypuszczać, że Kandydat brał udział w studiach doktoranckich prowadzonych przez Wydział Chemii UG). W roku 2004 Pan Artur Giędoń uzyskał stopień naukowy doktora nauk chemicznych w dyscyplinie chemia za pracę doktorską zatytułowaną: „Modelowanie molekularne oddziaływań receptorów wazopresyny i oksytocyny z wybranymi bioligandami”, której promotorem był prof. dr. hab. Jerzy Ciarkowski. W latach 2004-2005 Kandydat pracował na stanowisku asystenta na Wydziale Chemii UG. Natomiast kolejny okres kariery zawodowej, tj. lata 2005-2008, Habilitant spędził na stażu podoktorskim finansowanym przez program „Marrie Currie Host Fellowship”, pracując naprzemiennie w grupach prof. Schwalbego na Uniwersytecie Johanna Wolfganga Goethego we Frankfurcie nad Menem oraz prof. Luchinata na Uniwersytecie we Florencji. Po powrocie ze stażu przez 12 miesięcy, od października 2008 do września 2009, dr Giędoń pełnił funkcję specjalisty ds. informatyki na Wydziale Chemii UG, a następnie został zatrudniony na stanowisku adiunkta w Katedrze Chemii Teoretycznej, gdzie pracuje do chwili obecnej.

Dokumentacja dołączona do wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego wskazuje jednoznacznie, iż Habilitant jest wysokiej klasy specjalistą w zakresie stosowania pól siłowych do modelowania molekularnego białek i ich kompleksów. Tymi zagadnieniami Kandydat zajmował się już w



UNIWERSYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

czasie studiów doktoranckich. Faktycznie, Jego praca doktorska dotyczyła oddziaływań białek GPCR, receptorów wazopresyny i oksytocyny, z wybranymi antagonistami. Na osiągnięcie naukowe zatytułowane „Empiryczne pola siłowe, jako narzędzie w badaniu właściwości biologicznych wybranych białek receptorowych, proteaz serynowych oraz białek osocza” składa się 12 wieloautorskich publikacji. Przy czym ta wieloautorskość nie może być uważana za wadę, gdyż najczęściej wynika stąd, iż w swoich pracach dr Giełdoń interpretuje wyniki doświadczalne, za którymi często stoi liczny zespół badawczy. Dyskutując swoje osiągnięcie Kandydat wielokrotnie podkreśla konieczność współpracy z grupami eksperymentalnymi. Zgadzam się w pełni z tym poglądem. Rzeczywiście, mechanika i dynamika molekularna wykorzystująca pola siłowe, jak zresztą i inne podejścia chemii komputerowej (chemia kwantowa, metody korelacyjne typu QSPR/QSAR) mają sens przede wszystkim w kontekście ich zastosowanie do interpretacji wyników doświadczalnych. Podkreślając ten związek dr Giełdoń daje świadectwo dojrzałości naukowej. Jednocześnie swoimi publikacjami udowadnia, że znajdowanie związku między wynikami eksperymentów a opisem teoretycznym obiektów tych eksperymentów powinno być istotną wykładnią jakości i przydatności prowadzonych badań. I tak, posługując się empirycznymi polami siłowymi Habilitant przewidział lub wyjaśnił wpływ mutacji punktowych na aktywność proteolityczną białka HtrAE.coli, opisał dynamikę molekularnego mechanizmu aktywacji wybranych białek z rodziny HtrA, zidentyfikował reszty aminokwasowe odpowiadające za oddziaływanie białko – ligand oraz konformacje inhibitorów peptydowych wewnątrz kieszeni wiążącej w białkach NEP i APN, określił miejsca wiązania nanocząstek do wybranych białek osocza, czy wreszcie wyjaśnił różnice stabilności oligomerów HtrAE.coli i HtrAS.M.

Należy również podkreślić, że poza wykorzystywaniem pól siłowych do badania problemów konformacyjnych w białkach, oddziaływań białka-ligandy i wpływu otoczenia na mechanizmy działania protein, Kandydat aktywnie uczestniczył w rozwijaniu pola siłowego UNRES, a także rozszerzył program RASMOL, czyniąc z niego wyspecjalizowane narzędzie do analizy danych biomolekularnych. W chwili obecnej Kandydat pracuje nad implementacją łańcuchowego modelu Markova (MCM), do identyfikacji ścieżki zwijania białek, który stanowi rozszerzenie modelu trójstanowego, zakładającego jedynie formę rozwiniętą, stan przejściowy oraz formę zwiniętą białka. Zarówno prace nad gruboziarnistym polem siłowym UNRES, jak i rozwijanie innych powyżej wspomnianych podejść wymagało od dra Giełdonia zaawansowanych umiejętności programistycznych.

Filozofia badawcza, którą przyjął Habilitant, a mianowicie dążenie do weryfikowania rezultatów symulacji poprzez ich potwierdzenie eksperymentalne, wywarło wpływ praktycznie na całą Jego działalność



UNIwersytet GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

badawczą. Wpływ ten szczególnie jasno wyraża się we współpracy z licznymi grupami eksperymentalnymi zarówno z Wydziału Chemii UG, innych uczelni polskich oraz uniwersytetów zagranicznych. W tym kontekście należy wymienić zespoły eksperymentalne prof. Claudio Luchinat z Uniwersytetu we Florencji, prof. Haralda Schwalbe oraz Clemensa Glaubitza z JWGU we Frankfurcie, prof. Brice Korkmaz z Uniwersytetu w Turs, prof. Grzegorza Dubina z Uniwersytetu Jagiellońskiego, prof. Elżbiety Kamysz, Adama Lesnera, Elżbiety Jankowskiej, Tomasza Puzyna, Joanny Skórko-Głonek i Barbary Lipińskiej z Uniwersytetu Gdańskiego.

Już ta krótka charakterystyka działalności badawczej dr. Giełdonia pokazuje, że jest On dojrzałym naukowcem, realizującym własną tematykę badawczą. **Moja opinia o osiągnięciach naukowo-badawczych Kandydata musi więc być pozytywna.** Opinia ta została przygotowana w oparciu o kryteria zawarte w rozporządzeniu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego (Dz.U Nr 196, Poz. 1165, z dnia 1 września 2011 r.) oraz dokumentację opracowaną przez dra Giełdonia, na którą składają się:

- a) wniosek z 21 stycznia 2019 r. o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego,
- b) poświadczona kopia dyplomu doktorskiego,
- c) dorobek naukowy wraz z oświadczeniem wnioskodawcy dotyczącym wykonanych prac i procentowego w nich udziału (wersje polska i angielska),
- d) zeskanowane oświadczenia współautorów prac stanowiących osiągnięcie naukowe wnioskodawcy,
- e) autoreferat (wersje polska i angielska),
- f) opis osiągnięć naukowo-badawczych i edukacyjnych (wersja polska i angielska),
- g) kopie prac stanowiących osiągnięcie naukowe w formacie pdf.

- Na osiągnięcie naukowe Habilitanta składa się 12 oryginalnych publikacji opublikowanych w latach 2007-2016 w dobrych czasopismach międzynarodowych znajdujących się w bazie Journal Citation Reports takich jak: J. Mol. Model., ChemBioChem, J. Biol. Chem., Plos One itp. Współczynnik wpływu (IF) tych czasopism mieści się w zakresie 1,2-4,1, a publikacje tworzą monotematyczny cykl dotyczący modelowania molekularnego przy pomocy pól siłowych przemian konformacyjnych wybranych białek, ich oddziaływania z różnego typu ligandami oraz mechanizmu aktywacji/inhibicji. Cykl ten pełni rolę



UNIwersYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

osiągnięcia naukowego w myśl ustawy o stopniach naukowych. Oświadczenia współautorów oraz deklaracja własnego wkładu Habilitanta w przygotowanie wspomnianych publikacji nie pozostawia wątpliwości co do wiodącej roli Kandydata w powstaniu osiągnięcia.

- Sumaryczny IF dla ocenianego cyklu prac wynosi 35,491, co daje średnio 2,958 na jedną pracę. Parametry te dla całkowitego dorobku dra Giełdoń, na który składa się 39 publikacji (4 przed doktoratem, 35 po doktoracie), wynoszą odpowiednio 97,665 i 2,504. Moim zdaniem są to dobre charakterystyki, właściwe dla aktualnego etapu kariery naukowej Habilitanta.

- Według danych bazy Web of Science publikacje Kandydata były cytowane 260 razy (bez autocytowań). Zatem jest to dorobek znaczący, który został dostrzeżony i doceniony przez środowisko naukowe.

- Według tej samej bazy bibliograficznej indeks Hirscha dla całego dorobku Habilitanta wynosi 10, co można uznać za wynik prawidłowy.

- w latach 2013, 2016 i 2018 dr Giełdoń był beneficjentem zespołowej nagrody Rektora UG. W roku 2014 został laureatem wyróżnienia w konkursie im. Krzysztofa Celestyna Mrongowiusza, a w 2018 r. laureatem nagrody im. Andrzeja Wiśniewskiego

- Kandydat aż ośmiokrotnie pełnił rolę wykonawcy w grantach krajowych i zagranicznych. Jednak samodzielnie nigdy nie kierował projektem naukowym. Fakt ten należy uznać za słabość niniejszej aplikacji. Rzeczywiście, stworzenie własnego zespołu naukowego, bycie liderem wymaga oprócz odpowiednich cech osobowościowych, dobrej tematyki badawczej, doświadczenia w realizacji projektów naukowych również umiejętności w pozyskiwaniu środków na prowadzenie badań. Z drugiej strony można sobie wyobrazić sytuację, w której środki te pozyskiwane są poprzez współpracę z renomowanymi zespołami, posiadającymi odpowiednie finansowanie. Analiza dokumentacji dołączonej do wniosku wydaje się wskazywać, iż Kandydat jest zwolennikiem tej ostatniej metody pokrywania kosztów badań. Ponieważ opieranie własnej działalności naukowej na środkach finansowych zarządzanych przez innych jest jednak poważnym ograniczeniem, recenzent sugeruje Kandydatowi zwiększenie aktywności mającej na celu pozyskanie stosownych grantów.



UNIWERSYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

- Poza znacznym dorobkiem konferencyjnym (57 prezentacji), dr Giędoń wygłosił również 1 wykład na zaproszenie organizatorów Third Korean-Polish Conference on Protein Folding: Theoretical and Experimental Approches.

Oceniając dorobek dydaktyczny i popularyzatorski Kandydata oraz Jego współpracę krajową i międzynarodową mogę stwierdzić, że spełniają one całkowicie wymogi ustawowe i zwyczajowe dla Kandydatów do stopnia doktora habilitowanego.:

- Dr Artur Giędoń odbył jeden długoterminowy staż podoktorski w latach 2005-2008, w ramach którego prowadził badania naprzemiennie w dwóch instytucjach: Uniwersytecie Johanna Wolfganga Goethego we Frankfurcie nad Menem w grupie Prof. Schwalbego oraz w Uniwersytecie we Florencji w grupie Prof. Luchinata. Uczestniczył również w trzech stażach krótkoterminowych: 06.2011 – 08.2011 i 06.2012 – 08.2012 w Cornell University, USA oraz 02.2017 – 03.2017 w KIAS, Korea. W tym miejscu podkreślę, że ten ważny aspekt indywidualnej aktywności naukowej znacznie przekracza przeciętną aktywność w tym zakresie dzisiejszych pretendentów do stopnia doktora habilitowanego. Rzeczywiście, uczestnictwo habilitantów w stażach naukowych przekraczających długość jednego należy dziś do rzadkości.

- Habilitant dwukrotnie pełnił funkcję sekretarza polsko-koreańskiej konferencji na temat zwijania białek. W latach 2011-2015 i w roku 2017 był wydziałowym koordynatorem ds. Bałtyckiego Festiwalu Nauki. Organizował Dni Otwarte na Wydziale Chemii UG. Współorganizował „Uniwersalną Strefę Nauki” oraz „Magię Nauki” w Galerii Bałtyckiej. Był członkiem jury ogólnopolskiej olimpiady wiedzy „Niskie emisje.” Prowadził zajęcia interdyscyplinarne w ramach projektów: „Dziś nauka – jutro praca”, „SPEAK-TIK. Poprawa jakości kształcenia” i „Z Chemią Naprzód”. Wielokrotnie pozyskiwał środki na prowadzenie warsztatów popularno-naukowych w ramach Bałtyckiego Festiwalu Nauki (z Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz Wojewódzkiego Funduszu Ochrony Środowiska). Od 2009 roku jest doradcą Dziekana do spraw informatyzacji.

- Sprawował opiekę naukową nad jednym doktorantem, pełniąc funkcję promotora pomocniczego w jego przewodzie doktorskim. By promotorem dwóch prac magisterskich, a recenzował 11 innych.

- Na Wydziale Chemii UG prowadził wykłady oraz ćwiczenia z technologii informacyjnej, wykłady oraz ćwiczenia z chemii teoretycznej dla studentów I roku MSU (magisterskie studia uzupełniające) na



UNIWERSYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Katedra Chemii Fizycznej



Prof. dr hab. Janusz Rak, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63, tel. (+48 58) 523 5118, fax (+48 58) 523 5571, e-mail: janusz.rak@ug.edu.pl

studiach zaocznych oraz ćwiczenia z chemii teoretycznej dla studentów I roku MSU na studiach dziennych, i ćwiczenia z technologii informacyjnej dla I roku studiów licencjackich. Jest współautorem przedmiotów „Matematyczne Podstawy Modelowania Molekularnego” oraz „Elektroniczna Diagnostyka Chemiczna” uruchomionych dla studentów Biznesu Chemicznego.

Reasumując stwierdzam, że dr Artur Giełdoń jest dojrzałym badaczem, dysponującym odpowiednim warszatem badawczym oraz tematyką umożliwiającą kontynuowanie badań po uzyskaniu stopnia dra habilitowanego. Moim zdaniem posiada On wszystkie przymioty konieczne do stworzenia własnej grupy badawczej. Kandydat legitymuje się poważnym dorobkiem naukowym i uznaniem środowiska. Jest również dobrze przygotowany do prowadzenia działalności dydaktycznej i organizacyjnej.

Odnosząc się do wymogów ustawowych, nie mam więc najmniejszych wątpliwości, że przedstawiony mi do oceny cykl 12 publikacji naukowych stanowi **znaczny wkład** Autora w rozwój badań nad funkcjonowaniem białek, i że Habilitant wykazuje na tym polu **istotną aktywność naukową**. Uważam, iż przedstawiony materiał spełnia całkowicie wymogi Ustawy i uzasadnia nadanie dr. Arturowi Giełdoniowi stopnia doktora habilitowanego.