Uniwersytet Wrocławski

WYDZIAŁ BIOTECHNOLOGII

ZAKŁAD CYTOBIOCHEMII
ul. Fryderyka Joliot-Curie 14a
50-383 Wrocław

tel. +48 71 375 64 18

www.biotech.uni.wroc.pl/zaklad-cytobiochemii

Prof. dr hab. Aleksander F. Sikorski

Ocena

osiągnięcia naukowego Pana doktora Krzysztofa Murzyna w związku z postępowaniem (nr BCK-III-L-8407/2016) o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk biologicznych w dyscyplinie biofizyka.

Tytuł osiągnięcia: **„Własności strukturalne i dynamiczne interfazy dwuwarstw zbudowanych z fosfatydylocholiny, fosfatydyloetanoloaminy fosfatydyloglicerolu i lipidu A"**

Ocena formalna:

Razem z wnioskiem o nadanie stopnia doktora habilitowanego Pan dr Krzysztof Murzyn przedstawił: 1. kopie publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego pod wyżej wspomnianym tytułem, 2. szczegółowy wykaz publikacji z określeniem I.F.(impact factor), punktacji MNSW i krótkim określeniem swojej roli i udziału w projekcie oraz wykaz prac opublikowanych a nie wchodzących w skład osiągnięcia będącego podstawą postępowania, opis aktywności dydaktycznej oraz współprac naukowych („Załącznik 3") w języku polskim i angielskim, 3. zwięzłe podsumowanie tzw. „autoreferat" przedstawiające osiągnięcie oraz własną charakterystykę dorobku naukowego („Załacznik 2"), 4. oświadczenia współautorów prac wchodzących w skład osiągnięcia naukowego (Prof. dr hab. Marta Pasenkiewicz-Gierula - 5 oświadczeń, dr Tomasz Róg – 4 oświadczenia, Prof. Mikko Karttunen – 2 oświadczenia, dr Jeanine Milhaud, mgr Maciej Bratek, a także dr inż. Marcin Kurdziel po jednym oświadczeniu) określające ich udział w tych pracach, 5. „Opis dodatkowych wyników – „Załacznik 6" w języku polskim i angielskim, 6. kopię dyplomu doktora. Można zatem stwierdzić, że przedstawiona dokumentacja została złożona zgodnie z wymogami Ustawy.

Ocena merytoryczna osiągnięcia

Przedstawiony do oceny zestaw 5 prac (h1-h5) stanowiący osiągnięcie naukowe Autor prezentuje w postaci kilku rozwiązanych problemów związanych z oddziaływaniami grup polarnych lipidów z wodą w „interfazie dwuwarstwy". Są to: 1. wpływ struktury chemicznej głów polarnych lipidów na oddziaływania międzycząsteczkowe w interfazie dwuwarstw zbudowanych z PC, PE, PG oraz lipidu A, 2. Wpływ deuteracji wody na jej oddziaływanie z lipidami w interfazie dwuwarstwy zbudowanej z PC i 3. Wpływ protokołu symulacyjnego na własności interfazy dwuwarstw zbudowanych z PC, PE, PG oraz lipidu A.

Wyniki uzyskane odnośnie pierwszego zagadnienia doprowadziły do wniosku, że struktura grup polarnych lipidów odgrywa kluczową rolę w kreowaniu właściwości interfazy, a szczególną rolę pełnią grupy funkcyjne zdolne do tworzenia wiązań wodorowych oraz oddziaływań elektrostatycznych. Istotną rolę przypisuje też Autor cząsteczkom wody, które z jednej strony tworząc wiązania wodorowe tzw. pomosty wodne pomiędzy grupami polarnymi lipidów oraz z drugiej strony cząsteczkom o konfiguracji klatratowej, które otaczają grupy polarne lipidów nie tworzące wiązań wodorowych, ale też tworząc wiązania wodorowe z sąsiednimi grupami polarnymi lipidów pośredniczą w oddziaływaniach pomiędzy cząsteczkami lipidów. Oczywiście, istotne znaczenie mają według danych uzyskanych przez Autora oddziaływania elektrostatyczne pomiędzy obdarzonymi ładunkiem elektrycznym grupami tworzącymi polarne reszty lipidów. Dzięki wielkiej liczbie wspomnianych powyżej oddziaływań tworzą się rozległe sieci połączeń międzycząsteczkowych stabilizujących lamellarną strukturę dwuwarstwy lipidowej.

Analiza wpływu ciężkiej wody na właściwości dwuwarstwy wykazała praktycznie niezauważalny efekt na statyczny obraz interfazy, natomiast wyraźną zmianę właściwości dynamicznych tej strefy dwuwarstwy. Ta ostatnia zmiana przejawia się w zwiększeniu czasu życia oraz populacji długożyjących oddziaływań pomiędzy lipidami i wodą.

Ostatnia grupa zagadnień, która stanowi poważny element prezentowanego osiągnięcia to analiza wpływu ustawień protokołu symulacji oraz parametrów pola siłowego na uzyskany opis własności dwuwarstw zbudowanych z PC, PE PG oraz lipidu A. Autor dokonując krytycznej oceny oraz walidacji niektórych podejść symulacyjnych wnioskuje, że jedną z metod obliczeniowych dających dobre wyniki w symulacjach dwuwarstw zbudowanych z nieobojętnych cząsteczek lipidów jest metoda cząstka-sieć Ewalda. Stwierdza też: "W badaniach dwuwarstw lipidowych prowadzonych metodą dynamiki molekularnej szczególną uwagę należy zwrócić na odpowiednią parametryzację oddziaływań pomiędzy lipidami w interfazie dwuwarstwy. Wynikiem braków w parametrach pola siłowego przypisywanym nawet niewielkim fragmentom głowy polarnej może być niewłaściwe odtwarzanie stanu fazowego dwuwarstwy". Sformułowanie tytułu tej części podsumowania dorobku habilitacyjnego budzi niewielkie zastrzeżenia recenzenta, bo ustawienia protokołu symulacji nie

powinny zmieniać własności dwuwarstw, ale raczej własności dwuwarstw w uzyskanym modelu, bowiem w realnym świecie właściwości te nie ulegają zmianom w tych samych warunkach fizycznych. Należy dodać, że Kandydat do stopnia naukowego, ze względów formalnych nie zamieścił w dorobku interesującej pracy opublikowanej w Biointerphases (1, 98-105, 2006), której główne tezy przedstawił w postaci załącznika 6 „Opis dodatkowych wyników związanych z osiągnięciem naukowym". Badania wpływu struktury polarnych grup lipidów, PC, PE i PG metodą symulacji dynamiki molekularnej wykazały niewielki wpływ struktury grup polarnych lipidów na właściwości dynamiczne wody przy powierzchni dwuwarstw.

Zdaniem recenzenta osiągnięcie naukowe zaprezentowane przez Habilitanta stanowi oryginalny wkład w szeroko pojmowaną dziedzinę, jaką jest biofizyka błon biologicznych. Uzgodniony ze współautorami udział Habilitanta w prezentowanych jako składniki osiągnięcia pracach waha się od 30 (jedna praca) do 90% (dwie prace). Współczynnik wpływu (I.F.) tych prac zawarty jest w przedziale od 0.6 (jedna praca) poprzez 3,2-3,3(3 prace) do 4,6 (jedna praca). W dwóch pracach Kandydat jest też autorem korespondującym. Należy podkreślić, że powyższe prace ukazały się w stricte profesjonalnych czasopismach z dziedziny biofizyki i chemii biofizycznej. Renoma tych czasopism gwarantuje restrykcyjne recenzje artykułu przed przyjęciem do publikacji. Zatem ubieganie się Kandydata o stopień doktora habilitowanego w dziedzinie biofizyki uważam za w pełni uzasadnione.

Dorobek naukowy Habilitanta poza osiągnięciem stanowiącym podstawę postepowania habilitacyjnego.

Poza omówionym powyżej dorobkiem stanowiącym podstawę postępowania habilitacyjnego dr Krzysztof Murzyn jest autorem i współautorem 24 prac opublikowanych w czasopismach naukowych, Tylko 3 z nich nie posiadają współczynnika I.F. Należą tu prace z głównej dziedziny uprawianej przez Habilitanta, czyli badania dwuwarstw lipidowych poprzez modelowanie metodą dynamiki molekularnej (15 prac), dotyczące struktury białek oraz miejsc wiązania czynników transkrypcyjnych, jak również konstrukcji zaawansowanego oprogramowania komputerowego. Jego udział w pracach eksperymentalnych i przeglądowych Autor ocenia na kilka do 100 procent.

Dr Murzyn jest współautorem jednego skryptu do ćwi/;l0[-czeń z modelowania molekularnego dla studentów oraz współautorem przekładu podręcznika „Bioinformatyka i ewolucja molekularna" (Higgs P., i Attwood T.K., wyd. PWN 2008). Jest też współautorem wniosku patentowego, również w wersji PCT.

Aktywność naukowa

Aktywność naukowa Habilitanta przejawia się kierowaniem i udziałem w projektach badawczych, współpracą z zagranicznymi ośrodkami badawczymi

oraz czynnym udziałem w krajowych i międzynarodowych konferencjach naukowych.

Jeśli chodzi o udział w projektach badawczych, Kandydat kierował jednym projektem badawczym finansowanym przez NCN dotyczącym własności strukturalnych i dynamicznych błon bakterii Gram ujemnych. Poza tym był wykonawcą i głównym wykonawcą 9 projektów badawczych finansowanych przez MNiSW, KBN oraz V Program EU. Recenzował też 12 projektów badawczych MNiSW oraz NCN.

Jeśli chodzi o współpracę z ośrodkami zagranicznymi, to z 29 opublikowanych prac naukowych, 7 to prace opublikowane we współpracy z partnerami spoza Polski. Kandydat odbył też kilka, w zasadzie krótkoterminowych, staży naukowych w różnych ośrodkach europejskich oraz w USA.

Pan doktor Krzysztof Murzyn wziął czynny udział w 31 krajowych i zagranicznych konferencjach naukowych. W ramach 5 z nich wygłosił wykłady. Współpracował też z dwoma firmami, dla których wykonywał ekspertyzy.

Zatem doświadczenie w kierowaniu i recenzowaniu projektów badawczych, czynny udział w konferencjach naukowych oraz umiejętności współpracy z innymi ośrodkami należy uznać za bardzo dobre.

Dorobek dydaktyczny

Pan doktor Krzysztof Murzyn jest obecnie zatrudniony na stanowisku starszego wykładowcy na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego, zatem Jego aktywności dydaktyczne z racji pełnionej funkcji są względnie duże. Jednak Jego znacząca aktywność w tej dziedzinie jest związana z całym okresem zatrudnienia na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii. Świadczy o tym wspomniany wyżej udział w tłumaczeniu podręcznika Bioinformatyki oraz w zespole autorskim skryptu do ćwiczeń. Dr Murzyn opracował koncepcje i program 8 kursów informatyki i bioinformatyki, wspólnego z Prof. B. Tomaszewską kursu programowania w Python dla UAM i Politechniki Poznańskiej. Współopracował także programy studiów I stopnia Bioinformatyki oraz programu studiów II stopnia w tej dziedzinie. Dr K. Murzyn opiekował się 3 licencjuszami, 10 magistrantami a także pełni funkcje promotora pomocniczego w 2 przewodach doktorskich. Zatem Jego bogate doświadczenie dydaktyczne należy ocenić bardzo wysoko, szczególnie udział w kształtowaniu programu nauczania poszczególnych przedmiotów oraz znaczący udział w kształtowaniu programu nowych kierunków

studiów należy uznać za wyjątkowe. Doświadczenie w opiece nad młodymi adeptami nauki, do których należą magistranci i doktoranci stwarza dobre perspektywy dla nowego samodzielnego pracownika nauki.

Podsumowanie:

Powyższa analiza prowadzi do stwierdzenia, że zaprezentowane przez Habilitanta osiągnięcie: **„Własności strukturalne i dynamiczne interfazy dwuwarstw zbudowanych z fosfatydylocholiny, fosfatydyloetanoloaminy fosfatydyloglicerolu i lipidu A"** oraz dokonania naukowe po otrzymaniu stopnia doktora wykazują znaczny i znaczący wkład Autora w rozwój biofizyki, a Kandydat wykazuje istotną aktywność naukową (Ustawa z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595, ze zm. w Dz. U. z 2005 r. Nr 164, poz. 1365 oraz w Dz. U. z 2011 r. Nr 84, poz. 455 art. 17.1 oraz p. 4).

W skrócie: Autor po doktoracie opublikował 25 publikacji w tym 22 z listy JCR o sumarycznym współczynniku wpływu I.F.~72, łączny I.F publikacji stanowiących oceniane osiągnięcie to 15,3. Pozostały dorobek Habilitanta jest znaczący. Publikacje z jego udziałem wniosły znaczny wkład w zrozumienie ważnych aspektów struktury a przede wszystkim dynamiki błon biologicznych, struktury białek oraz innych problemów biologicznych rozwiązywanych przy pomocy podejść bioinformatycznych. Publikacje te należy zaliczyć do względnie wysoko cytowanych, bowiem przy 29 publikacjach Habilitanta liczba cytowań 770 i „indeks" Hirsha 15 stanowią o znaczącym zasięgu Jego dorobku naukowego.

Zatem z pełnym przekonaniem stwierdzam, że osiągnięcie zaprezentowane przez Pana doktora Krzysztofa Murzyna spełnia z powodzeniem wymogi i kryteria określone w ustawie (art. 17.1) z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki. Zatem zwracam się do Wysokiej Rady Wydziału Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego o nadanie Panu doktorowi Krzysztofowi Murzynowi stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Wrocław, 2017-03-22