



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

prof. dr hab. Krzysztof Lewiński

Kraków, 19.10.2016

Ocena osiągnięcia habilitacyjnego dr Mirosława Gilskiego „Metodyczne aspekty wysokorozdzielczej krystalografii makromolekuł” oraz całokształtu dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego

Wydział Chemii

Pan dr Mirosław Gilski, adiunkt na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza złożył wniosek o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego. Ze swojego dorobku naukowego dr Gilski wybrał 11 oryginalnych artykułów opublikowanych w latach 2007-2016, które pod wspólnym tytułem „Metodyczne aspekty wysokorozdzielczej krystalografii makromolekuł” wraz z pozostałą wymaganą przepisami dokumentacją przedłożył do oceny.

Dr Mirosław Gilski jest absolwentem Wydziału Matematyki i Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Studia ukończył w roku 1987 broniąc pracę magisterską pt. „Analiza konformacji cząsteczek organicznych metodą minimalizacji energii potencjalnej” wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. Jerzego Pietrzaka. W tym samym roku podjął pracę na Wydziale Chemii UAM na stanowisku inżynierjno-technicznym a od roku 1994 na stanowisku asystenta. Również w roku 1994 rozpoczął pracę w wymiarze ½ etatu na stanowisku starszego specjalisty w nowo utworzonym Centrum Badań Biokrytalograficznych Instytutu Chemii Bioorganicznej PAN. Stopień doktora nauk chemicznych uzyskał na Wydziale Chemii UAM w roku 2001, promotorem rozprawy doktorskiej zatytułowanej „Struktura molekularna i właściwości asocjacyjne kationu cytydyniowego i deoksycytydyniowego w kryształach wybranych soli. Badania rentgenograficzne” był prof. dr hab. Mariusz Jaskólski, z którym habilitant w dalszym ciągu nieprzerwanie współpracuje. Od roku 2002 jest zatrudniony na Wydziale Chemii UAM na stanowisku adiunkta kontynuując równoległe pracę w Centrum Badań Biokrytalograficznych.

ul. Ingardena 3

PL 30-060 Kraków

tel. +48(12) 633 63 77

fax +48(12) 634 05 15

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

Pan dr Gilski odbył również kilka staży zagranicznych. Przed doktoratem były to krótkoterminowe pobyty na uniwersytetach w Upsali oraz Halle natomiast, po doktoracie przebywał w latach 2002-2004 i 2009-2010 na dwóch długoterminowych stażach w USA.

Ocena całkowitego dorobku naukowego

Całkowity dorobek naukowy przedstawiony przez dr Gilskiego w dokumentacji załączonej do wniosku obejmuje 33 prace, spośród których 26 zostało opublikowanych w czasopiśmie z listy filadelfijskiej (JCR) a 3 zostały do takich czasopism wysłane. Ponieważ w chwili przygotowywania recenzji prace wysłane nie widniały na stronach czasopism jako prace przyjęte, nie mogą one być uznane za część rozpatrywanego w recenzji dorobku. Osiem spośród wymienionych powyżej prac zostało opublikowanych przed doktoratem, pozostałe 18 prac stanowi dorobek uzyskany w okresie ostatnich 15 lat, co daje niską przeciętną liczbę publikacji na rok. Wynik ten spowodowany jest głównie bardzo małą liczbą publikacji w okresie pierwszych 10 lat po doktoracie natomiast, w ostatnich 5 latach daje się zauważyć wyraźny wzrost dynamiki publikowania. Ten wzrost aktywności naukowej przekłada się również na istotność powstającego dorobku mierzonego współczynnikami oddziaływania czasopism (Impact Factor), w których ukazały się prace. Sumaryczny współczynnik IF wszystkich prac uwzględniający wartości z roku ukazania się pracy wynosi ok. 84,786 co daje wysoką średnią wartość na publikację równą 3,261. Te same parametry obliczone dla prac z okresu do roku 2010 wynoszą 23,057 i 1,647 natomiast dla prac opublikowanych od roku 2011 do chwili obecnej wynoszą 61,729 i 5,144. Liczby te wskazują dobitnie na nie tylko ilościowy wzrost liczby prac w ostatnim okresie, ale przede wszystkim na ich znacznie wyższy, wręcz znakomity, poziom naukowy. Warto też zwrócić uwagę na zmianę tematyki prac wchodzących w skład dorobku naukowego doktora Gilskiego. O ile prace opublikowane przed rokiem 2007 dotyczyły struktur krystalicznych związków małowcząsteczkowych, o tyle prace z późniejszego okresu są poświęcone niemal wyłącznie zagadnieniom związanym z badaniami strukturalnymi makrocząsteczek. Całkowita liczba cytowań wszystkich 26 prac wynosi 357 wg. Web of Science. Co prawda daje to wysoką średnią wynoszącą 13,7 cytowań na publikację jednak wynik ten jest zniekształcony, gdyż aż 146 cytowań dotyczy tylko jednej pracy, która ukazała się w Nature Structural and Molecular Biology. Tym niemniej, średnia obliczona bez uwzględnienia tej pracy wynosi 8,44 co w dalszym ciągu jest dobrym wynikiem i wskazuje, że jest to dorobek znaczący i cieszący się zainteresowaniem w środowisku naukowym. Wartość indeksu Hirsha dla dorobku doktora Gilskiego wynosi $h=8$, co jest wartością zadawalającą na tym etapie kariery naukowej.

W skład dorobku naukowego doktora Gilskiego wchodzi również 4 prace w czasopiśmie spoza bazy Journal Citation Reports, z których jedna jest umieszczona w części B listy czasopism punktowanych MNiSW. Stosunkowo skromna jest lista wystąpień konferencyjnych obejmująca łącznie 37 pozycji, w tym 8 przed doktoratem. Zwraca jednak na tej liście uwagę 11 wykładów a wśród nich aż 9 wykładów wygłoszonych na zaproszenie o tematyce związanej z wykonywaniem pomiarów dyfraktometrycznych na synchrotronie. Jest to niewątpliwy dowód uznania kompetencji w tej dziedzinie i rozpoznawalności doktora Gilskiego w środowisku naukowym.

Ważnym aspektem działalności naukowej habilitanta jest udział w realizacji projektów badawczych. W tym zakresie uważam, że przedstawiony dorobek jest niższy od oczekiwań wobec habilitanta. Doktor Gilski był wykonawcą w trzech zagranicznych projektach badawczych oraz jednym projekcie krajowym finansowanym ze środków NCN. Brał również udział w przygotowywaniu corocznych wniosków dla konsorcjum BioStruct-X w ramach 7 Programu Ramowego brak jednak w jego dorobku kierownictwa choćby małego, ale własnego projektu.

Ocena osiągnięcia habilitacyjnego

Cykl publikacji przedstawiony jako osiągnięcie naukowe obejmuje 11 oryginalnych powiązanych tematycznie prac. Ich łączny współczynnik IF wynosi 47.907, co dobitnie wskazuje, że ukazały się one w bardzo dobrych czasopiśmie naukowych. Całkowita liczba cytowań publikacji habilitacyjnych podana przez habilitanta wynosi 204, natomiast według aktualnych danych w bazie Scopus wynosi 225, z czego 155 przypada na pracę **H3** a 48 na pracę **H9**.

Doktor Gilski jest jedynym autorem trzech spośród jedenastu przedstawionych prac (**H1**, **H2**, **H11**) oraz pierwszym autorem w dwóch pracach wieloautorskich (**H4**, **H8**). Prace wieloautorskie liczą od 4 do 12 autorów. Pan dr Gilski deklaruje swój udział w tych publikacjach na od 25% do 80%. Do wniosku dołączone są oświadczenia prawie wszystkich współautorów o ich udziale w powstaniu prac, brak jest jedynie oświadczeń Franka DiMaio, Jamesa Thompsona oraz Zorana Popovica, którzy są współautorami prac **H3** i **H4**.

Zarówno charakter przedstawionych publikacji jak i ich tematyka są mocno zróżnicowane. Znajdują się wśród nich zarówno jednoautorskie prace przeglądowe poświęcone metodom eksperymentalnym i obliczeniowym w badaniach strukturalnych makrocząsteczek (**H1**, **H2**, **H11**) jak też, wieloautorskie prace związane z metodologią badań

strukturalnych (**H9, H10, H5**) oraz publikacje prezentujące wyniki badań białek (**H3, H4**) i kwasów nukleinowych (**H6, H7, H8**). To, co wiąże wszystkie powyższe prace, to kreatywne łączenie i wykorzystanie zaawansowanych technik prowadzenia eksperymentów oraz specjalistycznego oprogramowania w zakresie znacznie wykraczającym poza rutynowe obliczenia. Powoduje to jednak, że ocena przedstawionego osiągnięcia habilitacyjnego staje się trudna gdyż trudne jest określenie, **co właściwie stanowi to osiągnięcie?**

Częściową odpowiedź na to pytanie można uzyskać analizując udział Habilitanta w powstaniu poszczególnych prac. Wylania się wówczas kilka obszarów zainteresowania związanych zarówno z prowadzeniem eksperymentów jak też interpretacją ich wyników.

Pierwszy z nich dotyczy zbierania danych dyfrakcyjnych dla kryształów makrocząsteczek przy wykorzystaniu synchrotronowych źródeł promieniowania i pojawia się w pracach **H1, H6, H7, H8 i H11**. Oprócz zebrania danych na potrzeby projektów badawczych (H6, H7, H8), doktor Gilski prowadził też pomiary, których celem było opracowanie metodyki zdalnego zbierania danych na synchrotronie i automatyzacji tego procesu w celu zminimalizowania udziału operatora. Wyniki tych eksperymentów przedstawione są w pracy **H1** natomiast niektóre aspekty strategii pomiarowych przedstawione są w przeglądowej pracy **H11**.

Kolejnym etapem badań strukturalnych a równocześnie obszarem zainteresowań Habilitanta jest przetwarzanie obrazów dyfrakcyjnych. W pracy **H2** doktor Gilski porównuje skuteczność kilku najpopularniejszych programów używanych do tego celu zarówno w typowych zastosowaniach jak też dla trudnych przypadków kryształów zbliźniaczonych i pokazuje, jak umiejętne dobranie programu i jego użycie może znacząco polepszyć jakość uzyskanych danych. Swoje doświadczenie wykorzystuje przetwarzając dane dyfrakcyjne na potrzeby badań przedstawionych w pracach **H3, H4, H7** oraz **H8**. Ta ostatnia praca zasługuje na szczególną uwagę ze względu na występujące w kryształach wielodomenowe zbliźniaczenie oraz pseudosymetrię, co sprawiło, że przetworzenie obrazów dyfrakcyjnych stanowiło samo w sobie poważny problem krystalograficzny, którego inni badacze nie byli w stanie wcześniej rozwiązać.

Kluczowym elementem określenia struktury krystalicznej jest rozwiązanie problemu fazowego a następnie udokładnienie modelu. Wprawdzie współczesne programy umożliwiają w typowych przypadkach rozwiązanie struktury przy stosunkowo niewielkim udziale człowieka, jednak niekiedy pojawiają się przypadki, dla których kluczowe staje się zastosowanie niestandardowych procedur. Przypadki takie miały miejsce dla kilku struktur przedstawionych przez Habilitanta w pracach **H3, H4, H5, H6, H7** oraz **H8**.

Kryształy monomerycznej formy proteazy retrovirusowej okazały się zawierać cząsteczki budowie znacznie różniące się od dotychczas znanej formy dimerycznej, co sprawiało, że metoda podstawienia molekularnego, pomimo licznych prób, nie przyniosła zadawalających rezultatów. Kluczem do sukcesu okazało się zbudowanie przez użytkowników internetowej gry Foldit przeszło miliona modeli cząsteczki, z których jeden umożliwił rozwiązanie struktury i jej udokładnienie (**H3, H4**). Rola doktora Gilskiego w tym projekcie polegała między innymi na opracowaniu niestandardowych protokołów podstawienia molekularnego, przebudowie modelu wstępnego i udziale w jego udokładnianiu.

W przypadku struktur krystalicznych kwasów nukleinowych (**H6, H7, H8**) trudność polegała na ich bardzo wysokiej rozdzielczości wymuszającej użycie przez doktora Gilskiego niestandardowych protokołów udokładniania uwzględniających między innymi alternatywne konformacje i nieuporządkowanie. Problemy te zostały przedstawione przez Habilitanta również w pracy przeglądowej **H11**. Jednym z istotnych problemów zauważonych podczas prowadzenia udokładniania okazały się wartości stosowanych więzów stereochemicznych. Zaowocowało to powstaniem pracy **H9**, w której zaproponowane zostały modyfikacje powszechnie używanych bibliotek parametrów stereochemicznych oraz uzależnienie ich wartości od lokalnej konformacji. Praca ta wywołała dyskusję naukową, w której stanowisko autorów wobec głosów krytycznych zostało przedstawione w liście, który ukazał się w Acta Crystallographica D (**H10**). Nie jest to typowa praca badawcza lub przeglądowa, ale jej włączenie do dorobku habilitacyjnego uważam za uzasadnione, jako uzupełnienie argumentów zawartych w dyskusji w pracy **H9**.

Do dorobku naukowego doktora Gilskiego w części poświęconej nietypowym metodom rozwiązywania i udokładniania struktur należy również zaliczyć pracę **H5**. Zawiera ona interesujący przykład zastosowania metody podstawienia molekularnego do rozwiązania struktury związku supramolekularnego, dla którego klasyczne metody stosowane w analizie strukturalnej związków małocząsteczkowych nie dawały rozwiązania. Oprócz ostatecznej struktury w pracy przedstawione zostały szczegóły analizy, która doprowadziła do jej ustalenia. Praca **H5**, oprócz walorów poznawczych, zawiera cenne wskazówki metodyczne, które mogą być wykorzystane przez innych badaczy.

Podsumowując tę część oceny dorobku naukowego doktora Gilskiego stwierdzam, że jest on niewątpliwym ekspertem w zakresie analizy strukturalnej makrocząsteczek ze szczególnym uwzględnieniem wykorzystywania synchrotronowych źródeł promieniowania oraz udokładniania struktur makrocząsteczek wyznaczanych z rozdzielczością atomową. Doświadczenie w tym zakresie Habilitant zdobywał i wykorzystywał w znacznej mierze

rozwiązując problemy krystalograficzne będące częścią ambitnych projektów badawczych dotyczących struktur białek i kwasów nukleinowych a podsumował w jednoautorskich pracach przeglądowych. Osiągnięciem habilitacyjnym jest zatem, nie tylko udział w uzyskaniu ważnych wyników naukowych ale przede wszystkim, zgodnie z tytułem podanym przez Habilitanta, ich aspekt metodyczny. W szczególności jest to wytyczenie nowych dróg postępowania w prowadzeniu zarówno eksperymentów jak też obliczeń, oraz wskazanie obszarów ich zastosowań.

Ocena dorobku dydaktycznego i organizacyjnego

Biorąc pod uwagę kilkunastoletni okres zatrudnienia doktora Gilskiego na stanowisku adiunkta, analiza jego dorobku dydaktycznego budzi szereg zastrzeżeń. Lista prowadzonych zajęć dydaktycznych, aczkolwiek zróżnicowana tematycznie, ogranicza się do jednej tylko formy zajęć - ćwiczeń laboratoryjnych. Razi brak doświadczenia w opracowaniu i prowadzeniu np. autorskiego wykładu monograficznego lub seminariów. Z dokumentacji nie wynika, czy Habilitant miał jakikolwiek udział w opracowywaniu programu prowadzonych zajęć, przygotowywaniu pomocy dydaktycznych czy choćby instrukcji do ćwiczeń. Również brak zaangażowania w pracę ze studentami wykonującymi prace magisterskie lub licencjackie budzi moje zdziwienie i niepokój. Wymieniona w dokumentacji opieka naukowa nad magistrantką dotyczy okresu sprzed doktoratu. W ostatnich latach dr Gilski sprawował opiekę nad doktorantem oraz licencjatką, ale nie jest to równoważne z kierowaniem pracą dyplomową lub byciem promotorem pomocniczym. Także osiągnięcia w zakresie popularyzacji nauki są skromne i ograniczają się do jednego wykładu i artykułu popularno-naukowego. Jeszcze skromniej od dorobku dydaktycznego przedstawia się kwestia działalności organizacyjnej Habilitanta gdyż według załączonej dokumentacji sprowadza się ona do udziału w pracach komisji rekrutacyjnej na Uniwersytecie Medycznym w Poznaniu w roku 2013.

To, co moim zdaniem jest najistotniejszym elementem dorobku zarówno dydaktycznego jak i organizacyjnego i wyróżnia się wśród innych osiągnięć doktora Gilskiego zostało w autoreferacie ukryte w części poświęconej osiągnięciom naukowym. Za to osiągnięcie uważam zaangażowanie w stworzenie i uruchomienie Training, Implementation and Dissemination Center w Instytucie Chemii Bioorganicznej PAN. Jak można wyczytać w stanowiącej część osiągnięcia habilitacyjnego pracy **H1**, jego celem było między innymi prowadzenie szkoleń dla młodych krystalografów a zatem działalność jak najbardziej dydaktyczna, co więcej, prowadzona na forum międzynarodowym dla

doktorantów i studentów z całej Europy. Pan doktor Gilski brał w tym czynny udział i prowadził kilkakrotnie wykłady połączone z demonstracją zdalnego rejestrowania danych dyfrakcyjnych na synchrotronie. Nowatorski charakter tego eksperymentu został dostrzeżony przez media i zaprezentowany na antenie lokalnej telewizji oraz opisany w artykule o charakterze popularnonaukowym. Oceniam to, jako duże osiągnięcie zarówno organizacyjne jak też dydaktyczne połączone ponadto z popularyzacją nauki i osiągnięć polskich naukowców. Doktor Gilski był również zaproszonym wykładowcą na szkole biokrytalografii zorganizowanej w roku 2014 w Białymstoku. Pozwala mi to uznać ustawowe wymagania wobec habilitanta odnoszące się do osiągnięć dydaktycznych i organizacyjnych za spełnione.

Podsumowanie

Analiza dokumentacji przedstawionej przez dr Mirosława Gilskiego pozwala mi z stwierdzić, że Kandydat posiada niewątpliwe udokumentowane kompetencje i doświadczenie w zakresie badań strukturalnych makrocząsteczek. Opracowanie i wykorzystanie nietypowych procedur w rozwiązywaniu trudnych problemów badawczych zaowocowało uzyskaniem ważnych wyników naukowych. Z tego względu uważam, że jego osiągnięcia naukowe spełniają warunki nowości naukowej i wnoszą istotny wkład w rozwój dziedziny naukowej. Moje zastrzeżenia budzi jedynie brak udokumentowanego doświadczenia w kierowaniu projektami badawczymi, choćby niewielkimi ale własnymi, co jest jednym z kryteriów oceny zawartym w Rozporządzeniu. Tym niemniej, **uwąam, że w świetle kryteriów określonych w art. 16 ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki wraz ze zmianami opublikowanymi w Dz. U. Nr 84, poz. 455 z 2011 roku, przedstawione do oceny materiały stanowią wystarczającą podstawę do ubiegania się przez dr Mirosława Gilskiego o stopień doktora habilitowanego nauk chemicznych w dyscyplinie chemia.**

