



Politechnika Wroclawska

Prof. zw. dr hab.inż. Waclaw Andrzej Sokalski
Zakład Modelowania Molekularnego i Chemii Kwantowej
Politechnika Wroclawska
Wyb. Wyspiańskiego 27
50-370 Wroclaw

14 maja 2012 r.

Ocena osiągnięć naukowo-badawczych, dorobku dydaktycznego, popularyzatorskiego oraz współpracy międzynarodowej dr Mariusza Makowskiego w związku z toczącym się postępowaniem habilitacyjnym

Dr Mariusz Makowski ukończył w roku 1999 studia wyższe na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. W roku 2003 obronił na tym samym Wydziale rozprawę doktorską pt. "Badanie i modelowanie równowag kwasowo-zasadowych metodami mechaniki kwantowej oraz dynamiki molekularnej", której promotorem był prof. dr hab. Lech Chmurzyński.

Dr Mariusz Makowski opublikował 63 oryginalne prace naukowe, z czego 38 publikacji po uzyskaniu stopnia doktora nauk chemicznych. Ze wspomnianych 38 prac, 37 opublikowano w czasopismach z listy filadelfijskiej, w tym część w najbardziej renomowanych czasopismach międzynarodowych takich jak: Proceedings of National Academy of Sciences, Journal of Physical Chemistry względnie Journal of Computational Chemistry. Ponadto dr Makowski był współautorem 4 rozdziałów w wydawnictwach książkowych. Wszystkie przedstawione prace są wieloautorskie, ponieważ powstały w wyniku wieloletniej współpracy zespołu kierowanego przez prof. Adama Liwo z zespołem prof. Scheragi z Cornell University. W załączonych pisemnych oświadczeniach wszyscy współautorzy 9 prac wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej określili szczegółowo swój udział. Według oceny habilitanta udział ten wynosił od 30 do 70%.

Sumaryczny współczynnik oddziaływania czasopism w których były publikowane prace dr Makowskiego (impact factor w/g Journal Citation Reports z roku 2010) wynosi 150 (w tym prace wchodzące w skład rozprawy

habilitacyjnej 31.847). Do dnia 10 maja 2012 roku publikacje dr Makowskiego były cytowane przez innych autorów 367 razy (bez autocytowań). W tej liczbie 6 prac było cytowanych ponad 20 razy, natomiast na prace wchodzące w skład rozprawy habilitacyjnej inni autorzy powoływali się 52 razy, a indeks Hirscha wynosi 14.

Do dorobku naukowego dr Mariusza Makowskiego należy również dodać udział w szeregu konferencjach krajowych względnie międzynarodowych w USA, Kanadzie, Niemczech, Republice Południowej Afryki, Włoszech, Grecji, Japonii, Ukrainie, Hiszpanii, Australii, Wielkiej Brytanii i Republice Czeskiej.

W latach 2004-2010 dr Makowski odbył jeden długoterminowy oraz 4 krótkoterminowe staże naukowe w Cornell University (USA) w zespole prof. Harolda Scheragi, z którego udziałem powstały wszystkie publikacje wchodzące w skład rozprawy habilitacyjnej.

Przejdę teraz do oceny osiągnięć naukowych dr Makowskiego zawartych w 9 pracach opublikowanych w renomowanych czasopismach międzynarodowych J. Phys.Chem. B oraz Protein Engineering Design & Selection.

Głównym celem tych prac była próba udoskonalenia pola siłowego UNRES stosowanego do przewidywania struktury białek opracowanego wcześniej przez zespoły prof. Adama Liwo i prof. Harolda Scheragi. Szczególnie trudnym zagadnieniem jest realistyczny opis oddziaływań aminokwasów z hydrofobowymi łańcuchami bocznymi. Dlatego też bardzo ambitnym celem Habilitanta było zastąpienia empirycznego modelu Gay-Berne'a bardziej adekwatnym opisem oddziaływań grup bocznych aminokwasów. Warto jednak pamiętać, że nawet o wiele bardziej kosztowne modele uwzględniające wszystkie atomy często nie są w stanie precyzyjnie odtworzyć znanych struktur białek.

Do najważniejszych wyników uzyskanych w tym zakresie można zaliczyć:

- a) opracowanie modelu opisującego oddziaływanie sferoidalnych cząsteczek hydrofobowych
- b) wytestowanie różnych form opisu potencjałów oddziaływań amfipolarnych łańcuchów bocznych dla poszczególnych typów aminokwasów

c) zbadanie wpływu wielkości cząsteczek na oddziaływania hydrofobowe

d) wprowadzenie do pola siłowego UNRES potencjału zależnego od temperatury.

Proponowana przez Autora metodyka ma stanowić podstawę do uzyskania bardziej dokładnych struktur białek w przyszłości. Wymagać to jednak musi wszechstronnej i długotrwałej weryfikacji, np. w ramach kolejnych konkursów CASP. Dlatego racjonalną decyzją Autora była wstępne testowanie proponowanej metodyki dla prostszych hydrofobowych układów modelowych. Wyniki te zostały przedstawione w publikacjach wchodzących w skład rozprawy.

Proponowane modele oparte są na wielu przybliżeniach i wymagają stosowania wielu parametrów dlatego ostateczną ocenę ich przydatności może przynieść ich dalsze testowanie. Np. przyjęty przez Autora model kwadrupolowy może być niewystarczający do uzyskania poprawnego opisu oddziaływań elektrostatycznych na odległościach mniejszych niż ok. 10 Å

Dorobek naukowy dr Makowskiego na który składają się 63 publikacje oraz 49 prezentacji konferencyjnych uważam za znaczący. Warto dodać, że szereg innych prac Autora, nie wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej, zawiera również bardzo ciekawe i wartościowe wyniki, o czym może świadczyć liczba ponad 310 cytowań tych prac. Dorobek ten świadczy o aktywności Autora i jego ugruntowanej pozycji w społeczności naukowej.

Reasumując mogę stwierdzić, że dr Makowski uzyskał szereg oryginalnych wyników ilustrujących nowe możliwości teoretycznego badania struktur biologicznych o dużym stopniu złożoności. Autor rozprawy wykazał się gruntowną znajomością szerokiego zestawu współczesnych technik obliczeniowych stosowanych do badania układów makromolekularnych.

W zakresie działalności dydaktycznej Dr Makowski legitymuje się współautorstwem dwóch skryptów do ćwiczeń z chemii ogólnej oraz chemii nieorganicznej. Był również opiekunem 2 prac magisterskich i jednej licencjackiej.

Ponadto Dr Makowski kierował 7 projektami badawczymi, w tym 2 grantami MNiSzW, grantem Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej „Homing” oraz był wykonawcą 3 grantów MNiSzW, 2 grantów KBN oraz 2 prestiżowych grantów amerykańskich.

Kandydat był też recenzentem renomowanego czasopisma Journal of Physical Chemistry oraz pełnił funkcję sekretarza międzynarodowej konferencji naukowej.

Działalność kandydata znajdowała uznanie wyrażone zespołowymi nagrodami Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w 2002 oraz 2006 r., stypendium Fundacji Nauki Polskiej w 2002 i 2003 r., stypendium tygodnika Polityka w programie „Zostańcie z nami” w 2003 r., stypendium Ministra dla wybitnych młodych naukowców w 2007 r., oraz nagrodami Rektora Uniwersytetu Gdańskiego w 2003 i 2005 r.

Uważam, że dorobek naukowo-badawczy i dydaktyczny Kandydata oraz jego aktywność w zakresie współpracy międzynarodowej uzasadnia nadanie stopnia doktora habilitowanego. W związku z tym stawiam wniosek o dopuszczenie dr Mariusza Makowskiego do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



Prof. dr hab. inż. W. Andrzej Sokalski