

Prof. zw. dr hab. Wiesław Nowak
Instytut Fizyki
Uniwersytet M. Kopernika w Toruniu
87-100 Toruń
ul. Grudziądzka 5

Toruń, 14.08.2016 r.

(Wiesiek@fizyka.umk.pl)
+48.56 611-3204

Recenzja rozprawy habilitacyjnej
dr. Dominika Gronta pt.
„Opracowanie nowych algorytmów modelowania białek
i ich implementacja w pakiecie BioShell” (zbiór publikacji)
oraz ocena dorobku naukowego habilitanta

Badania białek prowadzone są intensywnie w czołowych laboratoriach światowych. Te pozornie nieskomplikowane biopolimery mają niezwykle własności: stanowią podstawowy budulec większości organizmów żywych oraz decydują o zachodzeniu i regulacji procesów życiowych. Śledzenie ewolucji białek poprzez porównywanie odpowiadających sobie układów w coraz wyższych ewolucyjnie organizmach pozwala zrozumieć, m. in., jak doszło do optymalizacji enzymów czy uzyskania funkcji sensorycznych w dużych biocząsteczkach. Białka są jednym z głównych celów w procesie poszukiwania nowych leków. Badanie struktury białek i porównywanie ich w nowoczesnej chemii, bioinformatyce czy biofizyce w znacznym stopniu opiera się dzisiaj na metodach komputerowych. Postęp w szeroko rozumianej biochemii białek zależy przede wszystkim od rozwoju i dostępności sprawnych metod badawczych, w tym algorytmów i kodów komputerowych. Przedstawiona mi do oceny cykl publikacji doktora Dominika Gronta należy do tego nurtu badań naukowych. Podejmowane prace są, moim zdaniem, ważne i potrzebne, dotyczą jak najbardziej aktualnych zagadnień i problemów. Dr D. Gront stworzył szereg użytecznych narzędzi do badania struktury białek i przyczynił się do poznania i zaprojektowania nowych układów enzymatycznych. Chociaż główne wysiłki kandydata są „interdyscyplinarne” i polegały na rozwijaniu algorytmów i programowaniu komputerów, nie mam wątpliwości, że uzyskane rezultaty wnoszą wkład do szeroko rozumianej chemii teoretycznej, chemii białek, bioinformatyki i kwalifikują się do ubiegania się o stopień naukowy dr hab. w dyscyplinie chemia.

Dr Dominik Gront uzyskał tytuł zawodowy magistra chemii, na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego w 2001 (temat pracy mgr „*Klasyczne i nowe techniki Monte Carlo w termodynamice białek*”), zaś stopień naukowy doktora nauk chemicznych (specjalizacja: chemia teoretyczna) w roku 2006 na tym samym wydziale UW („*Opracowanie algorytmu do modelowania struktur białkowych na podstawie baz danych sekwencji i struktur*”, promotor: prof. A. Koliński). Praca doktorska została wyróżniona najwyższą w Polsce (w tym zakresie) Nagrodą Prezesa Rady Ministrów. Warto też zauważyć, że dr Dominik Gront w latach 2012-15 otrzymywał bardzo prestiżowe stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla najwybitniejszych młodych naukowców. Wiem, że konkurencja w tym konkursie jest b. wysoka, osiągnięcie to świadczy o tym, że dr Gront uzyskał do 2011 roku osiągnięcia naukowe lokujące Go w czołówce polskich młodych uczonych.

Tematyka doktoratu i badań prowadzonych po doktoracie są zbliżone, plasują się w nurcie modelowania molekularnego, jednak zagadnienia jakim zajmował się habilitant oraz nowe programy i algorytmy istotnie wychodzą poza problemy rozwiązywane w doktoracie (np. prace H8, H9, H12).

Po uzyskaniu doktoratu (2006) dr D. Gront został zatrudniony na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego i, z przerwą w latach 2007-8 (postdoc na wydziale Molecular Physiology and Biological Physics, University of Virginia, Charlottesville, VA, USA), pracuje w tej samej jednostce. Kandydat ma bardzo dobre doświadczenie w pracy w międzynarodowym środowisku naukowym. Co najmniej 10 razy odbywał staże (od 1 m do ok. 3 lat) w takich instytucjach jak: Department of Biochemical Sciences „Rossi Fanelli”, University of Rome „La Sapienza”, Włochy; Dept. of Molecular Physiology and Biological Physics, University of Virginia, Charlottesville, VA, USA; Department of Biochemistry, University of Washington, Seattle, WA, USA; Battelle Center for Mathematical Medicine, Nationwide Childrens' Hospital, Columbus, OH, USA. Z dokumentacji wynika, że nie kierował dotąd samodzielnie żadnymi jednostkami organizacyjnymi.

Jako osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę do ubiegania się o habilitację Dr Gront przedstawił do oceny 12 publikacji (H1-H12), opublikowanych w latach 2007-2015, na ogół w dobrych i b. dobrych czasopismach międzynarodowych - głównie chemicznych, bioinformatycznych i fizycznych (J. Comp. Chem., Bioinformatics - 3x, J. Comp. Aided Comp. Des., J. Comp. Biol., Nucl. Acid Res., BMC Bioinformatics, WIREs Comp. Mol. Sci., J. of Biotech.; sumaryczny IF czasopism wynosi ok. 46, min. 0.66 Acta Phys. Pol., max. 8.2). Są to wyłącznie prace wieloautorskie (2-6), niektóre mają charakter stosunkowo krótkich not (H4, H6), jedna jest raczej przeglądowa (H10), najobszerniejsza liczy 14 stron. W większości prac D.Gront jest autorem korespondującym, w 9 pracach jest pierwszym autorem. Publikacje H1-H12 były do chwili składania dokumentacji cytowane ok. 120 razy (max. H1 ok. 60; nie wiem czy wyłączono autocytowania). Liczba cytowań publikacji „habilitacyjnych”, moim zdaniem, nie jest wysoka, ale po części wynika to z faktu, iż niektóre prace ukazały się niedawno, zaś inne dotyczą stosunkowo specjalistycznych zagadnień, jednak te publikacje D. Gronta zostały niewątpliwie już dostrzeżone w środowisku międzynarodowym. Wg oceny habilitanta Jego udział w powstaniu tych publikacji był co najmniej 50% (H5, H10, H12), a sięgał nawet 80-90% (H4, H6). Nie mam wątpliwości co do dominującego czy krytycznie ważnego wkładu dr. D. Gronta w powstanie tych publikacji. Oświadczenia współautorów są załączone do dokumentacji, nie budzą zastrzeżeń, poza stałym moim sceptycyzmem co do możliwości oceny wkładu osoby w powstanie publikacji z dokładnością do 5 %. Ważnym na tym etapie analizy osiągnięcia habilitacyjnego był dla mnie fakt stwierdzenia, czy praca dr Dominika Gronta nie sprowadzała się przypadkiem do prostego programowania pomysłów bardziej dojrzałych członków zespołów naukowych. Zarówno charakter publikacji jak i analiza oświadczeń współautorów pokazują, że tak nie było – w mojej ocenie dr D. Gront wniósł twórczy wkład w powstanie algorytmów, metod, samo prowadzenie obliczeń i analizy wyników, a oprócz tego napisał (długi) szereg ważnych programów komputerowych.

Zwięzłe omówienie publikacji z cyklu

H1. D. Gront*, S. Kmiecik, A. Kolinski, „*Backbone building from quadrilaterals: A fast and accurate algorithm for protein backbone reconstruction from alpha carbon coordinates.*”,
J. Comput. Chem. 2007; 28 1593-1597

W pracy tej autorzy formułują pomysłową metodę rekonstrukcji położenia atomów szkieletu białkowego z niepełnych danych jakimi są pozycje atomów C α . Pomysł metody nie jest całkowicie oryginalny, ale sformułowanie algorytmu i implementacja (zasługa DG) już tak. Wyniki przewidywania położenia są b. dobrej jakości, nie ustępują innym znanym metodom,

ale za to efektywność programu BBQ jest znakomita. Społeczność naukowa ma dostęp do tego programu, chociaż nie pod podanym w oryginalnej pracy adresem a raczej w postaci części pakietu BioShell (w Javie). Pracę tę oceniam wysoko, jest stosunkowo często cytowana, zakładam, że nie jest to prosty efekt doktoratu D. Gronta obronionego mniej więcej w czasie „submitowania” tego artykułu.

H2. D. Gront*, A. Kolinski, „*Efficient scheme for optimization of parallel tempering Monte Carlo method.*”, J. Phys.: Condens. Matter, 2007; 19 036225

W tej publikacji autorzy we wstępie dyskutują (nieco chaotycznie) metody typu wymiany replik (RE) zastosowane w schemacie obliczeń Monte Carlo (MC). Do obliczenia własności termodynamicznych z zespołu struktur (konformacji) danego białka wymagane jest by konkretne obszary krajobrazu energetycznego wchodziły do populacji z odpowiednimi wagami. Wyznaczenie tych wag jest obliczeniowo trudne i przygotowanie zespołów jest ważnym zadaniem teoretyków. Szczególnie trudna sytuacja powstaje, gdy stosuje się efektywny schemat próbkowania zwany właśnie wymianą replik (lub PT MC). D. Gront wraz z prof. A. Kolińskim podali sposób by zapewnić potrzebne w dalszych analizach termodynamicznych stałe nakrywanie rozkładów, np. gęstość stanów, z sąsiednich okien próbkowania przestrzeni konformacyjnej (w metodzie WHAM). Jest to sposób iteracyjny, przewyższający efektywnością znane wcześniej podejścia (rys. 6 z pracy H2 tego dowodzi). Rozkład pożądaný uzyskuje się poprzez odpowiedni dobór temperatur replik w konkretnym danym układzie. W tej pracy pomysł metody wyszedł od habilitanta, On też zaimplementował metodę i wykonał zasadnicze obliczenia. Metodę tę wykorzystywano też w późniejszych publikacjach nt. optymalizacji obliczeń PTMC w ramach modelu CABS. Część obliczeniowa artykułu jest napisana przekonująco, argumenty przemawiające za metodą oparte są na konkretnych testach na peptydzie GB1P. Tego typu prace są potrzebne, bowiem pokazują, że w modelowaniu stale trzeba poszukiwać ulepszeń i konieczne jest staranne analizowanie ograniczeń (tu – charakteru zespołu statystycznego generowanego w przybliżonym schemacie MC) tak by unikać artefaktów w modelowaniu.

H3. A. Sikorski* and D. Gront, „*Thermodynamic properties of polypeptide chains. Parallel tempering Monte Carlo simulations*”, Acta Physica Polonica B, 2007 38 1899-1908

Ta pokonferencyjna praca (prezentowana już w roku 2006) stanowi przykład wykorzystania wcześniej dyskutowanej metody zapewnienia efektywnego próbkowania przestrzeni konformacyjnej w ramach schematu PT MC do badania przejścia stan nieuporządkowany (*random coil*) – struktura globularna w modelu gruboziarnistym krótkiego peptydu. Autorzy sprawdzają jak efektywny jest nowo proponowany schemat. Praca nie zawiera nowych wyników metodologicznych, ale stanowi ilustrację użyteczności wcześniej podanego schematu obliczania zespołów statystycznych w przypadku metod wymiany replik MC. Pewne moje zaciekawienie wzbudził wykres Fig. 5 z tej publikacji, dwa minima wykresu F vs E są dyskutowane, niestety autorzy nie podali w jaki sposób obliczali energię swobodną F badanego modelu peptydu, nie jest też dla mnie oczywiste asymptotyczne zachowanie tej zależności.

H4. D. Gront*, A. Kolinski, „*T-Pile - a package for thermodynamic calculations of biomolecules.*”, Bioinformatics; 2007; 23: 1840 - 1842.

Praca ta stanowi notkę informującą o możliwościach program T-Pile opracowanego przez habilitanta. Informuje, iż program (a w zasadzie kolekcja programów) może służyć jako

narzędzie w interpretacji wyników modelowania typu PT MC. Ponownie dyskutowane są wyniki przykładowe dla białka GB1P (fragment białka G). Cenną częścią tego pakietu jest stworzenie nowych możliwości porównywania sekwencji białkowych (narzędzie PRAline w pakiecie Bioshell). „Bioinformatics” to bardzo dobre czasopismo i dziwi mnie wyjątkowo mała liczba cytowań tej pracy (2), sądzę, że narzędzia stały się częścią większego pakietu i stąd to doniesienie nie jest już cytowane, mimo oczywistej użyteczności prezentowanych tam algorytmów. Na stronie www Zespołu też nie widać linku do *T-pile*.

H5. D. Gront* and A. Kolinski, „*Comparative modeling without implicit sequence alignments*”, *Bioinformatics*, 2007; 23 2522

Praca ta bardzo mi się podoba. Autorzy „atakują” ważny problem : jak modelować struktury białkowe nie mając dobrych wzorców? Zwykle stopień podobieństwa interesujących nas białek jest mały albo nie ma struktury podobnej do naszej w bazie pdb. Co wówczas można zrobić? W pracy H5 podano praktyczny schemat postępowania prowadzący do użytecznych informacji i konstrukcji modeli 3D opartych na racjonalnych przesłankach. Wykorzystywane są oprócz podobieństwa sekwencji, zgodność przewidywanych struktur drugorzędowych, lokalna geometria, profile hydrofobowości. Przykłady znalezionych taką metodą struktur podane w publikacji mają znakomitą jakość – uzyskana modele mają wszelkie cechy struktur rzeczywistych. Szkoda tylko, że w tej ciekawej i ważnej publikacji udział dr D. Gronta sprowadzał się głównie do realizacji obliczeń, z opisu nie wynika by idea tego sposobu budowy modeli była Jego pomysłem. Udział w tym projekcie (50%) i tak uważam za duży wkład habilitanta do modelowania białek.

H6. D. Gront*, A. Kolinski, „*Utility library for structural bioinformatics*”, *Bioinformatics*, 2008; 24 584

Publikacja ta jest zapewne jedną z ważniejszych w dorobku dr. D. Gronta, ponieważ w b. zwięzłej formie prezentuje wyniki wielu dni pracy – pakiet Bioshell integrujący wcześniej opracowane programy, zawierający 40 000 linii kodu, 260 klas, napisany w uniwersalnym i łatwo przenaszalnym języku JAVA. Publikacja nie zawiera nowych wyników „chemicznych” jednak osiągnięciem jest tutaj stworzenie i podanie do publicznego użytku poważnego systemu ułatwiającego modelowanie. Bez narzędzi nie byłoby postępu w tej dziedzinie. Program ten jest nadal rozwijany, cenne jest to iż na www dostępna jest dokumentacja. Pakiet lub jego elementy są używane w wielu laboratoriach na świecie. Jako użytkownik podobnych systemów wysoko oceniam wysiłek i nakład pracy oraz determinacje autorów potrzebne do opracowania i udostępnienia tak rozbudowanego narzędzia. Warto zaznaczyć, że pisanie takiego pakietu wymaga nie tylko zdolności programistycznych czy z dziedziny inżynierii oprogramowania, ale również dogłębnej znajomości metod modelowania właściwych dla tego działu chemii teoretycznej, fizyki i niektórych metod matematycznych.

H7. D. Gront*, A. Kolinski, „*A fast and accurate methods for predicting short-range constraints in protein models*”, *J. Comput. Aided Mol. Des*, 2008, 783-8.

W pracy tej autorzy w dość szczegółowy sposób omawiają problem nakładania więzów w strukturalnym modelowaniu homologicznym. Podany algorytm wydaje się ogólny, dość szczegółowo opisany, podane są w publikacji argumenty na rzecz użyteczności proponowanego podejścia. Praca dowodzi pewnej biegłości w dziedzinie analizy rozkładów oraz pomysłowości w wyprowadzaniu tzw. potencjałów statystycznych. Ma charakter nieco

„techniczny”, jednak dziwi mnie to, iż nie została zupełnie zauważona w środowisku osób zajmujących się modelowaniem homologicznym struktur białkowych.

H8. P. Gniewek, A. Kolinski, D. Gront, „*Optimization of profile-to-profile alignment parameters for one-dimensional threading*”, J. Comput. Biol., 2012 19:879-886.

Budowa nowej struktury białkowej wymaga dobrych wzorców strukturalnych. Z biblioteki można wyłować takie wzorce o ile ma się skuteczną metodę ich wskazania. Często stosowanym podejściem jest wykorzystanie uliniowienia opartego na przyrównaniu profili badanego białka i kandydata na wzorec. W tej ładnie napisanej pracy autorzy analizują jaki sposób przyrównywania jest najlepszy do stosowania w modelowaniu nowych struktur w oparciu o metodę jednowymiarowego przewlekania. Poszukują parametrów dających największą szansę poprawnego wyboru wzorców. Rolą habilitanta w powstaniu tej publikacji było implementowanie omawianych pomysłów w Bioshellu i wykonywanie części obliczeń oraz współredagowanie manuskryptu, wkład do tej solidnej pracy był więc dominujący.

H9. D. Gront*, P. Wojciechowski, M. Blaszczyk, A. Kolinski, „*Bioshell Threader: protein homology detection based on sequence profiles and secondary structure profiles*”, Nucl. Acid Res., 2012

Pomysły dyskutowane w publikacji H8 zostały zaimplementowane w kolejnym pakiecie Bioshell Threader, którego głównym autorem jest dr D. Gront. Serwer dostępny w sieci stosuje 3 niezależne metody do określenia jakie foldy przestrzenne są najbardziej prawdopodobne dla zadanej sekwencji jednej domeny badanego białka. Jest to pytanie zadawane tysiące razy w wielu laboratoriach białkowych. Oczywiście są dostępne inne serwery realizujące to zadanie, jednak wysiłek autorów został doceniony publikacją w NAR (NAR jest wymagającym czasopismem) ponieważ każde takie nowe narzędzie przybliży nas do lepszego wykorzystania ogromnych zasobów informacji zgromadzonych w bazach sekwencji białkowych (rzędu 100 mln białek). Informacje te mogą być efektywnie przetwarzane i wykorzystywane tylko dzięki postępowi w algorytmach i rozwojowi serwerów podobnych do tych tworzonych przez dr. D. Gronta.

H10. D. Gront*, S. Kmiecik, M. Blaszczyk, D. Ekonomiuk, and A. Kolinski, „*Optimization of protein models*”, WIREs Comput Mol Sci, 2012; 2 479-493.

Jest to praca przeglądowa, Tutaj DG napisał poważną część przeglądu. Podsumowane są wcześniejsze doświadczenia grupy w tworzeniu modeli białek.

H11. P. Gniewek, A. Kolinski, A. Kloczkowski, D. Gront*, „*BioShell-Threading: versatile Monte Carlo package for protein threading*” BMC Bioinformatics 2014 15:22

B. solidnie wygląda praca opisująca kolejny pakiet modelowania struktury białek opracowany przy wiodącym udziale dr D. Gronta. W tym przypadku idea przewlekania (*threading*) połączona została z ideą wykorzystania metod MC do poszukiwania właściwych wzorców strukturalnych. Praca prezentuje duży ładunek nowości, ciekawych pomysłów, połączeń cech najlepszych metod czy algorytmów. Program, a raczej pakiet, odpowiada na potrzeby wielu badaczy białek, z pewnością będzie też używany jako referencyjny software do testowania

innych metod rozwijanych w przyszłości. Plusem dla habilitanta jest tutaj to, że brał on udział w projektowaniu opisywanego algorytmu, co można uznać na tworzenie nowej metody obliczeniowej.

H12. L. Wieteska*, M. Ionov, J. Szemraj, A. Kolinski, C. Feller, D. Gront*, „*Improving thermal stability of thermophilic L-threonine aldolase from Thermotoga maritima*” J. of Biotechnology, 2015 199:69-76.

Chociaż deklarowana rola dr D. Gronta w tym dziele nie jest wielka (*w mojej ocenie szacunek 50% jest zbyt optymistyczny zważywszy na to, że ktoś inny miał pomysł co badać, i zakres metod eksperymentalnych opisanych w publikacji*), ma ona moim zdaniem duże znaczenie do pozytywnej oceny całości osiągnięcia habilitacyjnego. Jest to typowa, obszerna praca biotechnologiczno-chemiczna. Zespół badaczy o różnych specjalnościach rozwiązuje konkretny problem : jak poprawić cechy enzymu. Doświadczenie w modelowaniu dr D. Gronta jest tutaj kluczowe w zaproponowaniu nowych, obiecujących wariantów enzymu. Jest to ładny przykład możliwości jakie daje modelowanie w „prawdziwej” chemii, oby takich publikacji wychodziło z udziałem tej grupy jak najwięcej.

Reasumując stwierdzam, że przedstawione mi do oceny współautorskie publikacje (H1-H12) dra. Dominika Gronta są na dobrym poziomie naukowym, każda wnosi większy lub mniejszy wkład w arsenał programów i metod badań komputerowych białek. Główny wkład habilitanta polegał na twórczym implementowaniu różnych pomysłów związanych z modelowaniem białek metodami gruboziarnistymi i techniką Monte Carlo. Prace te zostały zauważone w społeczności specjalistów i chociaż liczba cytowań prac jak na chemię jest raczej niewielka, to kompensuje ten minus coraz szersze grono użytkowników narzędzi stworzonych przez habilitanta. Uważam, że należy doceniać taką, może pozornie „techniczna”, pracę w nauce. Moim zdaniem przedstawiony cykl prac spełnia ustawowy wymóg wniesienia znaczącego wkładu do chemii teoretycznej w ogólności, a bioinformatyki czy modelowania białek w szczególności.

Ocena pozostałego dorobku naukowego

Pozostały dorobek naukowy habilitanta jest dobry. Wykaz obejmuje 16 prac współautorskich w czasopismach z listy ISI oraz 11 w czasopismach nie indeksowanych tamże. Są w tym wykazie stosunkowo liczne czasopisma z wysokim IF. Łączny IF habilitanta sięga 100, ma on ponad 440 cytowań (WoS), indeks h=13. Uważam te wskaźniki bibliometryczne, zważywszy na tematykę, za bardzo przyzwoite. Tematyka dorobku oscyluje wokół zagadnień algorytmicznych modelowania gruboziarnistego białek, ale zauważalne są też solidne prace aplikacyjne, o charakterze *stricte* biologiczno-chemicznym. Zdolność do współpracy i

dostarczanie użytecznych informacji grupom eksperymentalnym b. pozytywnie świadczy o habilitancie.

Dr D. Gront jest aktywny w życiu naukowym, prezentował wyniki w formie referatów 16 razy na konferencjach międzynarodowych, w tym 6 razy na zaproszenie. Był stypendystą programu Marie Curie – odbył staż zagraniczny w czołowym światowym laboratorium białkowym u prof. Davida Bakera, University of Washington, Seattle, WA. Należy do grona ekspertów utrzymujących jeden z kluczowych, światowych serwerów białkowych „Rosetta”.

Udział w projektach naukowych i działalność organizacyjna

Habilitant wykazywał bardzo dobrą aktywność w dziedzinie realizacji i kierowania projektami naukowymi. W latach 2011 do teraz kierował, bądź kieruje co najmniej czterema projektami naukowymi, m.in. : „Zintegrowane do rozpowszechnienia hydroksylacji z użyciem enzymów P450 w procesach przemysłowych” (kierownik projektu ERA-NET-IB/HyPerIn/07/2014); Projekty w ramach ERA-NET IB: ProAChim (główny wykonawca polskiej części projektu).

Działalność dydaktyczna i popularyzatorska

Osiągnięcia dydaktyczne dr Domika Gronta są bardzo dobre. Wypromował 4 licencjatów oraz 6 magistrów. Prowadził szereg wykładów kursowych (Bioinformatyka, Modelowanie molekularne, Struktura Polimerów i Biopolimerów) i ćwiczeń (m.in. chemia kwantowa A). Prowadził zajęcia w języku angielskim. Działalność popularyzatorską oceniałbym jako słabą - w wykazie jest zaledwie jeden wykład. Nie pełnił funkcji promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim.

Współpraca krajowa i międzynarodowa:

Dr D. Gront współpracował z wieloma ośrodkami zagranicznymi, głównie w USA, Jego działalność ma wymiar międzynarodowy.

Wyróżnienia i odznaczenia

Habilitant zdobył Nagrodę Premiera za pracę doktorską oraz stypendium MNiSZW dla wybitnych młodych naukowców.

Konkluzja

Przedstawione do oceny osiągnięcia habilitacyjne, moim zdaniem, stanowi istotny wkład do chemii. Można zastanawiać się, czy zawiera ono dostatecznie dużo nowych wyników stricte chemicznych i czy nie jest to dorobek zbyt „algorytmiczny”. W mojej ocenie tak obszerny dorobek w dziedzinie tworzenia narzędzi krytycznie ważnych w modelowaniu chemicznym w pełni zasługuje na to by być podstawą nadania stopnia dr habilitowanego. **Dorobek naukowy Pana dr. Dominika Gronta jest więcej niż dobry.** Osiągnięcia dydaktyczne są bardzo dobre, a dorobek organizacyjny, zwłaszcza w dziedzinie kierowania projektami naukowymi, też w pełni odpowiada wymaganiom na tym etapie rozwoju. Stwierdzam, że osiągnięcia te spełniają wymagania sformułowane w Ustawie 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 z późn. zm., Dz. U. z 22 grudnia 2014, poz. 1852 – tekst jednolity). Opinia moja oparta jest, m.in., o kryteria podane w rozporządzeniu ministra z dnia 1 września 2011 (Dz.U. nr 196, poz. 1165). **Składam zatem wniosek o dopuszczenie dr. Dominika Gronta do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.** Wg mnie kandydat zasługuje na uzyskanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, dyscyplinie chemia.

W. Nowak