



UNIwersYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Zakład Modelowania Molekularnego



Tel. +48 58 523 5124, fax +48 58 523 5012, email: adam.liwo@ug.edu.pl

Gdańsk, dnia 31.10.2016 r

prof. dr hab. Józef Adam Liwo
Wydział Chemii Uniwersytetu Gdańskiego
ul. Wita Stwosza 63
80-308 Gdańsk

Ocena osiągnięć naukowo-badawczych oraz dorobku dr Joanny Idy Sułkowskiej, w związku z toczącym się postępowaniem habilitacyjnym

Pani dr Joanna Sułkowska (z domu Kwiecińska) ukończyła studia magisterskie na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego i uzyskała tytuł zawodowy magistra fizyki w roku 2003. Pracę doktorską pt. „Stretching and folding proteins in coarse grained models” wykonała w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk pod kierunkiem prof. dra hab. Marka Cieplaka. Stopień doktora nauk fizycznych (z wyróżnieniem) uzyskała w roku 2007. Począwszy od roku 2013 jest zatrudniona na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego na stanowisku adiunkta a począwszy od roku 2014 jest kierownikiem grupy badawczej „Interdisciplinary Laboratory of Biological Systems Modelling” w Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego.

Pani dr Joanna Sułkowska opublikowała łącznie 31 prac w czasopismach z listy JCR (28 po uzyskaniu stopnia doktora), 2 artykuły w czasopismach spoza listy JCR (jeden przed a jeden po uzyskaniu stopnia doktora), 2 rozdziały w książkach oraz 1 artykuł w pamiętnikach zjazdowych (wszystkie po uzyskaniu stopnia doktora). 19 prac, z tego 18 opublikowanych w czasopismach z listy JCR a jedna w czasopiśmie spoza tej listy, stanowi osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego. Po uzyskaniu stopnia doktora p. dr Joanna Sułkowska wygłosiła 41 wystąpień ustnych na konferencjach międzynarodowych, z czego 23 (!) stanowiły wykłady na zaproszenie. Przedstawiła też 8 prezentacji plakatowych a 3 razy została zaproszona jako ekspert do paneli dyskusyjnych. Wygłosiła 15 seminariów w ośrodkach naukowych krajowych i zagranicznych. Na dzień składania wniosku, jej prace były cytowane 833 razy bez autocytowań (według bazy Web of Science) a ich sumaryczny współczynnik wpływu (IF) wynosi 183,86. Indeks Hirscha p. dr Joanny Sułkowskiej wynosił, w dniu składania wniosku, 16. Według przytoczonych danych scjentometrycznych, jej dorobek naukowy jest wybitny i zdecydowanie przekracza dorobek naukowy nawet bardzo dobrych habilitantów.

Osiągnięcie naukowe p. dr Joanny Sułkowskiej będące podstawą wniosku o wszczęcie postępowania habilitacyjnego jest zatytułowane „**Klasyfikacja i krajobraz energetyczny zapętlnionych białek: węzły, slipknoty oraz lassa**”. Jak wspominałem, zostało ono opublikowane w postaci cyklu 19 prac, z czego 18 ukazało się w czasopismach naukowych z listy JCR (pozycje H1-H4 oraz H6-H19) a jedna w czasopiśmie spoza tej listy (pozycja H5; czasopismo TASK Quart.). Prace te powstały w latach 2009-2016 a ich sumaryczny współczynnik wpływu wynosi 115,75 (średnio 6,09 na pracę). Jedna z tych prac (pozycja H16) była cytowana ponad 80 razy a inna (pozycja H12) ponad 50 razy. Wszystkie 18 prac z listy JCR zostały opublikowane w dobrych i bardzo dobrych czasopismach specjalistycznych (Proc. Natl. Acad. Sci. USA, J. Am. Chem. Soc., PLoS Comput. Biol., Phys. Rev. Lett., Nucl. Acid Res., Biochem. Soc. Trans., J. Phys. Cond. Matter). Pani dr Sułkowska jest autorem korespondującym 9 publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe, pierwszym autorem 7 z nich a jednocześnie autorem pierwszym i korespondującym 3 z nich. W 5 pracach ocenia swój wkład na 50-70%, w pozostałych na 15-45%. Te oceny współbrzmia z oświadczeniami współautorów. Należy ponadto zwrócić uwagę, że w najpóźniejszych z tych prac współautorami są osoby nad którymi dr Sułkowska sprawuje opiekę merytoryczną, stąd zapewne nie przypisuje sobie ona wkładu ponad 50%. Bez żadnych wątpliwości pani dr Joanna Sułkowska była liderką ogromnej większości badań opisanych w jej cyklu habilitacyjnym. Stworzyła koncepcję ogromnej większości prac stanowiących osiągnięcie naukowe, opracowała modele, napisała samodzielnie dużą część oprogramowania, wykonała większość obliczeń, zinterpretowała wyniki oraz nadzorowała całość projektu. Mogę zatem z pełną odpowiedzialnością wyciągnąć wniosek, że wiodący wkład Kandydatki do prac będących składających się na osiągnięcie naukowe oraz jej samodzielność jako naukowiec w pełni kwalifikują ją do otrzymania stopnia doktora habilitowanego.

Ponieważ fakt opublikowania prac składających się na osiągnięcie naukowe Kandydatki w renomowanych czasopismach oznacza, że zostały one pozytywnie ocenione przez niezależnych ekspertów, moja rola jako recenzenta osiągnięcia naukowego sprowadza się do oceny, czy zakres i znaczenie badań są podstawą do nadania Kandydatce stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych. Powyżej stwierdziłem, że osiągnięcie naukowe powstało z pomysłu i pod wyłącznym kierownictwem Kandydatki zatem jeden z warunków koniecznych jest spełniony.

Tematyką osiągnięcia naukowego p. dr Joanny Sułkowskiej, jest tworzenie struktur o topologii węzłów, "slipknotów" oraz lass w białkach. Występujące w tytule osiągnięcia naukowego oraz w tekście autoreferatu słowa "slipknot" zamieniłbym raczej na wdzięczne polskie słowo "pętelka" albo określenia bardziej opisowe takie jak np. "węzeł ruchomy" lub "węzeł samo zaciskający się". Te elementy strukturalne występują w całkiem znaczącej liczbie struktur białek, jednak pierwsza wzmianka o nich pojawiła się dopiero w roku 1994 i długo uważano je za twory bardzo egzotyczne. Jest to o tyle dziwne, że skoro ludzkość posługuje się węzłami w celu mocowania lub unieruchamiania różnych obiektów zapewne od czasów przedhistorycznych to jest wręcz oczywiste, że tego typu elementy istotnie i względnie tanim kosztem wzmacniające strukturę wykształciły się w toku trwającej miliardy lat ewolucji struktur białek i innych makromolekuł biologicznych.

Przedstawione do oceny osiągnięcie naukowe Habilitantki robi duże wrażenie z uwagi na zakres i ogrom wykonanej pracy. Można w nim wyróżnić dwa duże działy, z których pierwszy dotyczy wykrywania, klasyfikacji i analizy zapętleń w strukturach naturalnych białek a druga symulacji ścieżek zwijania i krajobrazów energii swobodnej białek z tymi elementami przy użyciu głównie modeli gruboziarnistych oraz pełnoatomowych opartych na strukturach natywnych (SBM, ang. Structure Based Model), zwanych czasami modelami Gō. Najważniejsze osiągnięcia naukowego Habilitantki można moim zdaniem podsumować następująco:

1. Opracowanie narzędzi do wykrywania i opisu zapętleń w białkach, przeprowadzenie pierwszej na świecie klasyfikacja białek z węzłami (prace H6, H7 i H12), pętelkami (prace H17 i H18) oraz lassami (praca H1). W tej części pracy Autorka opracowała dwa serwery do automatycznej klasyfikacji zapętleń w białkach: KnotProt i LassoProt. Opracowała oryginalny model macierzowy pozwalający wykrywać i opisywać zapętlenia (praca H12), jak również model powierzchni minimalnej do wykrywania i opisu topologii lassa (praca H1). Przy użyciu opracowanej metodologii stwierdziła obecność skomplikowanego węzła typu 6_1 w białku leptynie (praca H13). Wykazała również, że topologia węzła jest zachowywana nawet przy niskim podobieństwie sekwencyjnym białek odległych od siebie ewolucyjnie ale należących do jednej rodziny (praca H12).
2. Zbadanie roli zapętleń w białkach (prace H1, H4, H11, H12, H16 i H19). Autorka wykazała, że 91% białek o zawężonej topologii pełni funkcję enzymatyczną oraz, że położenie węzła jest skorelowane z centrum aktywnym (praca H12). Wykazała również, że większość zawężonych białek występuje w organizmach termofilnych albo żyjących w bardzo niskim lub wysokim pH co sugeruje, że węzły są elementem stabilizującym strukturę (prace H15 i H19). Podobnie, w organizmach termofilnych występują także białka zawierające motyw lassa, motyw ten pełni również rolę czynnika stabilizującego w innych typach białek (prace H1, H3, H4).
3. Zbadanie metodami symulacyjnymi mechanizmu tworzenia węzłów, pętelek i lass w białkach (prace H11, H16, H17, H19). Badania te były prowadzone głównie przy użyciu modeli SBM, jednak część badań przeprowadzono również przy użyciu pola gruboziarnistego CABS opracowanego w grupie prof. Andrzeja Kolińskiego oraz przy użyciu symulacji pełnoatomowych na dedykowanym do obliczeń dynamiki molekularnej superkomputerze ANTON (praca H14). Przeprowadzone symulacje umożliwiły Autorce wyciągnięcie wniosku, że modele SBM są bardzo skuteczne także do opisu zwijania i zawężania białek co nie jest wnioskiem oczywistym, ponieważ oddziaływania nienatywne, obecne w tym modelach jedynie jako potencjał wyłączonej objętości, z konieczności odgrywają dużą rolę w procesie zwijania z zawężaniem. Stwierdziła również, że etapem najwolniejszym procesu, a przez to określającym szybkość zwijania, jest etap ostatni, czyli przeciąganie końca łańcucha przez pętlę, co kończy tworzenie węzła i że z tego powodu zwijanie z zawężaniem jest znacznie wolniejsze od zwijania białek niezawierających zapętleń. Ten wniosek znalazł potwierdzenie eksperymentalne.

4. Zbadanie metodami symulacyjnymi krajobrazu energii swobodnej białek zawierających zapętlenia poprzez symulowane mechaniczne rozciąganie (prace H2, H5, H9, H10, H14). Autorka wykazała istnienie węzła w stanie zdenaturowanym białka (praca H8), sformułowała wzór określający prawdopodobieństwo rozwiązania węzłów (praca H15), jak również odkryła stany metastabilne białek zawierających pętelki i wytłumaczyła ich obecność (praca H18).

Oprócz prac stanowiących osiągnięcie naukowe, p. dr Joanna Sułkowska prowadziła prace nad teoretycznym przewidywaniem struktur białek, gdzie opracowała metodę DCA-Fold, będącą hybrydą metod opartych na fizyce i metod bioinformatycznych, prowadziła teoretyczne badania nad mechanicznym rozwijaniem białek, stosowała modele gruboziarniste do badań termodynamiki zwijania białek oraz prowadziła badania teoretyczne nad właściwościami wiskoelastycznymi polimerów. Efektem tych prac jest 10 publikacji w czasopiśmie z listy JCR opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora.

Streszczone powyżej dokonania w ramach osiągnięcia naukowego oraz jej pozostały dorobek naukowy p. dr Joanny Sułkowskiej dają pojęcie o ogromie pracy i szerokim zakresie zrealizowanych pionierskich badań, które były pierwszymi na świecie tak kompleksowymi i pełnymi badaniami nad białkami zawierającymi zapętlenia. Z uwagi na rolę oddziaływań nienatywnych, których ważność Autorka niejednokrotnie podkreśla w swoich publikacjach, na pewno zajdzie konieczność użycia bardziej uniwersalnych wiarygodnych modeli gruboziarnistych do uzyskania pełnego obrazu procesu zwijania białek z zapętleniem. Tym niemniej, ponieważ jak na razie nie powstał jeszcze żaden uniwersalny (tj. zwijający dowolne białko nawet do struktury podobnej do natywnej) model gruboziarnisty a modele pełnoatomowe są zbyt drogie obliczeniowo a poza tym również nie są uniwersalne, użycie modeli SBM było konieczne na tym etapie badań. Zatem z pełnym przekonaniem stwierdzam, że zakres i poziom badań wchodzących w skład osiągnięcia naukowego spełnia z ogromną nawiązką wymagania stawiane kandydatom stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych.

Pani dr Joanna Sułkowska umie bardzo efektywnie pozyskiwać fundusze na badania naukowe. Kierowała i kieruje 6 grantami badawczymi oraz 1 grantem obliczeniowym (grant Early Science w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego UW). W tej liczbie znajduje się grant Homing Plus z Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej, który prowadziła w latach 2012-2014, obecnie prowadzone granty Sonata Bis z Narodowego Centrum Nauki, rozpoczęty w roku 2013, oraz grant Ideas Plus z Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego, rozpoczęty w bieżącym roku. Była głównym wykonawcą grantu promotorskiego w latach 2006-2007 oraz grantu obliczeniowego na superkomputerze ANTON w latach 2011-2012. Ponadto w 5 innych grantach pełniła rolę wykonawcy. Uzyskała również 8 grantów na organizację organizowanych przez siebie konferencji, w tym bardzo prestiżowy grant z Biophysical Society na organizację BPS Thematic Meeting w Warszawie w roku 2013, z EMBO w latach 2015 i 2016 oraz z Banff na organizację konferencji w Banff w Kanadzie w roku 2012.

O wysokiej ocenie działalności naukowej p. dr Joanny Sułkowskiej świadczy również fakt, że była 23 razy zaproszona do wygłoszenia wykładów na konferencjach międzynarodowych oraz że jej rozprawa doktorska została wyróżniona przez Radę Instytutu Fizyki PAN. Ponadto, począwszy od roku 2010, jest recenzentem prac nadsyłanych do redakcji czasopism specjalistycznych z listy JCR, w tym tak renomowanych jak J. Am. Chem. Soc., Proc. Natl. Acad. Sci. USA i PloS One. Odbyła staże naukowe w renomowanych ośrodkach krajowych i zagranicznych w tym długoterminowy staż podoktorski w University of California San Diego, pod kierunkiem światowej sławy teoretyka zajmującego się zwijaniem białek, prof. Jose Onuchica oraz krótkoterminowe staże naukowe na Uniwersytecie w Lozannie w Szwajcarii, Uniwersytecie w Amsterdamie (Vrije), University of Iowa, Rice University oraz Instytucie Fizyki PAN. Dzięki odbyciu tych staży naukowych nawiązała współpracę ze światowymi liderami badań nad zwijaniem białek. Ponadto uczestniczyła 5 krajowych i międzynarodowych szkoleń mających na celu naukę kierowania grupą badawczą, prezentacji i komunikacji naukowej.

Za swoją działalność naukową p. Joanna Sułkowska otrzymała liczne nagrody i wyróżnienia: nagrodę za najlepszą pracę doktorską w IF PAN w roku 2008, Young Researcher Award w roku 2013 z EMBO, CBSB14 Young Researcher Award w roku 2014 (jest to nagroda przyznawana 5 młodym naukowcom zgłaszającym najlepsze komunikaty na konferencję From Computational Biology to Systems Biology), nagrodę Outstanding Women in Science z Fundacji Roberta Boscha w roku 2016 oraz wspomniany wcześniej grant Ideas Plus z MNiSW w roku 2016.

Pani dr Joanna Sułkowska posiada bardzo bogate doświadczenie dydaktyczne. Prowadziła i prowadzi na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego zajęcia z fizyki (ćwiczenia audytoryjne, ćwiczenia laboratoryjne i proseminarium) oraz pracownię magisterską i licencjacką. Ponadto, na University of California, San Diego, prowadziła w latach 2008-2011 wykłady i ćwiczenia z przedmiotów "Thermodynamics of Proteins (PHY-490)", "Thermodynamics and mechanical properties of proteins" oraz "Folding and Thermodynamics of Proteins". Posiada też bogate doświadczenie mentorskie: była opiekunem 4 prac magisterskich i 4 licencjackich oraz jest promotorem pomocniczym w 3 przewodach doktorskich.

Pani dr Joanna Sułkowska posiada również doświadczenie organizacyjne, o czym wspominałem już przy okazji pozyskiwania przez nią funduszy na organizację konferencji naukowych. Od roku 2014 kieruje Interdyscyplinarnym Laboratorium Modelowania Układów Biologicznych w Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego. Była głównym organizatorem 5 konferencji międzynarodowych a członkiem komitetu organizacyjnego sześciu. Brała również udział w organizacji dwóch szkół letnich. W czerwcu 2016 roku zorganizowała tygodniowe warsztaty Krajowego Funduszu na Rzecz Dzieci dla młodzieży wybitnie uzdolnionej. W latach akademickich 2014/15 i 2015/16 organizowała regularne seminaria w Centrum Nowych Technologii UW a w roku akademickim 2012/13 zorganizowała seminaria wydziałowe na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego z udziałem zagranicznych wykładowców. W roku 2014 zorganizowała na Wydziale Chemii

UW wykład popularnonaukowy pt. "Entanglement in Biology", wygłoszony przez prof. DeWitt Sumnersa z Florida State University.

Ważnym elementem działalności p. dr Joanny Sułkowskiej jest działalność popularyzatorska oraz włączenie się w prace nad przyszłością polskiej nauki. Opublikowała ona 15 artykułów popularnonaukowych oraz udzieliła dwóch wywiadów dla Radia TokFM na temat swojej pracy naukowej. Dowodem na istotne znaczenie jej działalności popularyzującej naukę jest fakt, że w roku 2013 została finalistką konkursu popularyzatorsko-interdyscyplinarnego „Skills/Inter” Fundacji na rzecz Nauki Polskiej. W roku 2015 uczestniczyła w zorganizowanej przez MNiSW debacie "Jakie mają być nasze uczelnie i polska nauka?" a w roku 2014 uczestniczyła w zorganizowanej przez EFC i FNP konferencji "Towards a new concept of excellence in research".

Podsumowując stwierdzam, że dorobek p. dr Joanny Sułkowskiej, w tym osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego, spełnia z nawiązką wymagania określone w znowelizowanej Ustawie o Stopniach Naukowych i Tytule Naukowym z dnia 14 marca 2003 r ze zmianami z dnia 11 marca 2011 roku. Pozostałe aspekty działalności Kandydatki jednoznacznie wykazują, że jest ona niezwykle rzetelnym, pracowitym i samodzielnym młodym naukowcem o ogromnej wiedzy merytorycznej, znakomitym dydaktykiem oraz umie skutecznie pozyskiwać fundusze na badania a następnie kierować projektami badawczymi realizowanymi przez zespoły interdyscyplinarne, jak również profesjonalnie zorganizować grupę badawczą i kierować nią. Śmiało można w stosunku do niej zastosować określenie "established scientist". Dlatego z pełnym przekonaniem wnoszę do Wysokiej Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego o dopuszczenie p. dr Joanny Idy Sułkowskiej do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.



prof. dr hab. Józef Adam Liwo