

Prof. dr hab. Anna Maciołek
Instytut Chemii Fizycznej
Polskiej Akademii Nauk
ul. Kasprzaka 44/52
01-224 Warszawa

Warszawa, 05 czerwca 2024

Recenzja rozprawy doktorskiej
mgr Radosta Waszkiewicza
pt. „Hydrodynamic techniques in the study of elastic macromolecules”,
wykonanej w Instytucie Fizyki Teoretycznej na Wydziale Fizyki
Uniwersytetu Warszawskiego
pod kierunkiem dr hab. Macieja Lisieckiego, prof. UW

Rozprawa doktorska mgr Radosta Waszkiewicza przedstawia wyniki badań o charakterze teoretycznym i przy użyciu obliczeń numerycznych dotyczące ważnych i ciekawych układów należących do kategorii miękkiej materii, mianowicie elastycznych makromolekuł. Zainteresowanie elastycznymi makromolekułami utrzymuje się od dziesięcioleci na niezmiennie wysokim poziomie ze względu na ich powszechną obecność w przyrodzie oraz możliwość ich syntezy do różnych zastosowań, m.in. do tworzenia materiałów polimerowych. Przedmiotem szczególnie intensywnych badań są makrocząsteczki biologiczne, takie jak białka i kwasy nukleinowe, które są niezbędne do życia. Znacząca część niniejszej rozprawy doktorskiej koncentruje się na badaniu konformacji elastycznych sztywnych minipętli DNA i miękkich struktur białek nieuporządkowanych oraz wpływu zmienności konformacji na ich dyfuzję i sedymentację. Jako, że cząstki te są istotne biologicznie, można śmiało stwierdzić, że tematyka rozprawy doktorskiej znajduje się w głównym nurcie aktualnych badań w tej dziedzinie. Nowatorstwo i wagę uzyskanych wyników potwierdza fakt, że Kandydatowi i współautorom jego artykułów udało się przekonać redaktorów i recenzentów prestiżowych czasopism naukowych do przyjęcia ich manuskryptów do publikacji.

Rozprawa doktorska Pana Radosta Waszkiewicza została przygotowana w oparciu o aż 6 prac, co jest wynikiem zdecydowanie powyżej średniej. Cztery artykuły opublikowane zostały w latach 2020, 2021 i 2023. Dwa manuskrypty zostały umieszczone w repozytoriach elektronicznych: arXiv (cond-mat.stat-mech) i bioRxiv. Według podanej przez Kandydata informacji, znajdują się one obecnie w procesie recenzji w bardzo dobrych czasopismach międzynarodowych (Physical Review E i Journal of Physical Chemistry Letters).

Trzeba podkreślić, że wszystkie opublikowane prace ukazały się w renomowanych międzynarodowych czasopismach z listy filadelfijskiej o dużej liczbie punktów MNiSW. Czasopismo Journal of Physics: Condensed Matter ma wartość współczynnika wpływu (Impact Factor) $IF = 2,7$ za rok 2023 i 40 pkt MniSW za rok 2024. Journal of Fluid Mechanics ma $IF = 3,7$ za rok 2023 i 140 pkt MniSW za rok 2024. Biologiczne czasopismo Nucleic Acid Research posiada $IF = 14,9$ za rok 2023 i 200 pkt MNiSW za rok 2024. SciPost Physics Codebases ma $IF = 4,99$ ale liczba pkt MniSW dla tego czasopisma nie jest określona.

We wszystkich publikacjach będących podstawą rozprawy, Pan mgr Waszkiewicz jest pierwszym autorem, co wskazuje na bardzo duży udział w tworzeniu tych publikacji. Dwie publikacje powstały we współpracy jedynie z promotorem, jedna we współpracy z jeszcze jednym, poza promotorem, autorem. Zgodnie z zamieszczonym oświadczeniem do tego właśnie artykułu, udział Kandydata, będącego jednocześnie autorem korespondencyjnym, można ocenić na bardzo znaczący, z pewnością powyżej 50%. Dwie publikacje są wynikiem współpracy pomiędzy grupami doświadczalnymi i zespołem teoretycznym, a zatem posiadają więcej współautorów. Tutaj również, w oparciu o oświadczenia Kandydata, można stwierdzić, że mgr. Waszkiewicz miał dominujący udział w powstaniu teoretycznej i numerycznej części tych prac.

Dla wszystkich prac wchodzących w skład rozprawy doktorskiej, Pan mgr. Waszkiewicz zarówno wykonał obliczenia numeryczne, przygotował i przeanalizował wyniki przedstawione w formie wykresów lub tabel, jak i napisał pierwszą wersję artykułu oraz zredagował wszystkie kolejne wersje. Świadczy to o dużym zaangażowaniu autora. We wszystkich pracach brał udział w rozwoju opisu teoretycznego, a w jednej z prac teoretyczno-eksperymentalnych zaproponował metodę numeryczną. Co więcej, dwa artykuły powstały w wyniku jego samodzielnych pomysłów. Do realizacji jednego z tych pomysłów Kandydat stworzył i poprowadził małą grupę badawczą. Wszystko to wskazuje na to, że mgr. Waszkiewicz osiągnął już pewną dojrzałość i niezależność naukową, raczej niespotykaną na tym etapie kariery naukowej. Współautorstwo trzech artykułów powstałych w latach 2023 i 2024 poza tematyką niniejszej rozprawy doktorskiej, w tym jednej opublikowanej w tak znakomitym czasopiśmie jak *Physical Review Letters*, świadczy o wyjątkowej aktywności mgr. Waszkiewicza i jego szerokich zainteresowaniach naukowych.

Układ rozprawy doktorskiej Pana mgr Waszkiewicza jest zgodny z normami przyjętymi dla tego typu opracowań. Recenzowana rozprawa doktorska składa się ze streszczeń w języku angielskim i polskim i czterech rozdziałów: wstępu, krótkiego rozdziału wyliczającego pakiety oprogramowania rozwiniętego do realizacji niniejszej rozprawy doktorskiej, oraz rozdziału, w którym przedstawione są oryginalne wyniki badań (w postaci dopiętych 4 opublikowanych artykułów i dwóch manuskryptów). Godne pochwały jest to, że pakiety oprogramowania wraz z dokumentacją zostały udostępnione do ogólnego użytku w repozytorium GitHub i że są napisane w języku programowania Python, który jest obecnie bardzo popularny. Rozprawę dokorską kończą wnioski, informacja dotycząca innej aktywności badawczej Kandydata i bibliografia.

W streszczeniu oraz w krótkich komentarzach poprzedzających dołączone artykuły, Autorowi udało się w dość przystępnej a zarazem syntetycznej formie przedstawić całość zagadnienia, naświetlić cele, wykorzystane metody i przebieg badań oraz podkreślić ważność uzyskanych wyników. Wyniki znajdujące się w artykułach i manuskryptach przedstawione zostały w formie wykresów, tabel, wzorów analitycznych jak i oprogramowania. Cały materiał graficzny został wyraźnie opisany. Artykuły i manuskrypty są dobrze napisane i starannie przygotowane, jednakże możnaby sobie życzyć większej staranności w przygotowaniu wstępu oraz niektórych komentarzy. Oprócz tzw. literówek, zdarza się, że tekst nie jest samodzielny i trzeba sięgać do innych źródeł aby go śledzić ze zrozumieniem. Moim zdaniem jest to wada, która utrudnia wykorzystanie prac doktorskich jako źródła szczegółowej wiedzy, zwłaszcza o technikach wykonawczych, na którą często nie ma miejsca w publikacjach. Wymienię tutaj tylko kilka przykładów: w sekcji 1.1 wartość liczbowa stosunku gęstości do lepkości dla wody użyta do policzenia liczby Reynoldsa nie jest

podana, wielkości L i M nie są zdefiniowane. W sekcji 1.2 symbole $\hat{r}$ czy Δ_i nie są zdefiniowane jak również przydałoby się podać referencje do dekompozycji Choleskiego, czy też rozszerzyć dyskusję prowadzącą do wyrażeń 1.13 i dalszych. W sekcji 1.4 norma w równaniu 1.37 nie jest zdefiniowana itd. Pomimo, że wstęp do rozprawy doktorskiej według mojego przekonania jest zbyt zwięzły i mógłby być przejrzystej napisany, to jego treść wskazuje na posiadanie przez Kandydata ogólnej wiedzy teoretycznej z zakresu hydrodynamiki, procesów stochastycznych, procesów dyfuzji, technik eksperymentalnych i metod modelowania elastycznych makromolekuł i ich transportu. Pan mgr Waszkiewicz zacytował 81 publikacji (włączywszy swoje własne) w tym, oprócz klasycznych już podręczników i prac przeglądowych około 12 prac powstałych w ostatnich 6 latach, co wskazuje na ciągły rozwój tematyki prezentowanej w pracy doktorskiej.

Jednym z głównych celów wytyczonych przez Pana mgr Waszkiewicza jest rozwój podejść teoretycznych do opisu procesów transportu makromolekuł elastycznych, które bazującą jedynie na oddziaływaniach elastycznych w połączeniu z siłami lepkości i fluktuacjami termicznymi. Zrozumienie współzawodnictwa tych trzech podstawowych oddziaływań w zjawiskach dyfuzji czy sedymentacji dla makromolekuł w szerokim zakresie ich sprężystości jest widziane przez autora rozprawy jako fundament dalszego rozwoju uwzględniającego bardziej specyficzne oddziaływania, n.p. elektrostatyczne.

Drugim głównym celem sformułowanym przez Kandydata jest zastosowanie skonstruowanych modeli do interpretacji wyników eksperymentalnych dla współczynników dyfuzji różnych bio-makromolekuł i w ten sposób weryfikowanie słuszności wszelakich uproszczających założeń zastosowanych modeli.

Dążąc do osiągnięcia postawionych celów Kandydat rozważał różne scenariusze z udziałem zarówno sztywnych krótkich DNA modelowane jako sztywne pręty (Artykuł 1) czy sztywnych minipętli DNA (Artykuł 2), jak i elastycznych pętli (Artykuł 3) lub superwiotkich białek nieustrukturyzowane (Artykuł 5). Autor rozprawy pokazuje, że w zależności od scenariusza różne oddziaływania dominują tensor mobilności a w rezultacie dyfuzję makromolekuły. Bardzo ciekawym zagadnieniem poruszonym w rozprawie doktorskiej jest stabilność na wyginanie sedymentującego elastycznego pierścienia wyznaczona przy użyciu prostych teorii elastyczności i lokalnego oporu hydrostatycznego z fluktuacjami termicznymi i bez nich. Do opisu minipętli DNA i superwiotkich białek nieustrukturyzowanych Autor użył dwóch różnych modeli ziarnistych, gdzie w przypadku pierwszego z nich fluktuacje termiczne są pomijalne a w przypadku drugiego są dominujące. Metodologia wyznaczania promienia hydrodynamicznego a w konsekwencji współczynnika dyfuzji dla obu przypadków omówiona jest w sekcji 1.4 wstępu. Nie jest ona nowa i opiera się na schemacie opracowanym w grupie teoretycznej Uniwersytetu Warszawskiego, przez Bogdana Cichockiego, Piotra Szymczaka i innych. Na uwagę zasługuje złożoność procedur wyznaczania współczynników dyfuzji w przypadku, gdy elastyczność, fluktuacje termiczne i hydrodynamika są jednakowo ważne. Opanowanie tych procedur było niezbędne do zrealizowania postawionych celów naukowych.

Wnioski zwięźle sformułowane przez Kandydata na końcu rozprawy jak i dyskusje zawarte w artykułach pozwalają ocenić najważniejsze osiągnięcia recenzowanej rozprawy doktorskiej. Są to bez wątpienia zgodne z doświadczeniem przewidywania dotyczące promienia hydrodynamicznego dla minipętli DNA w zależności od stopnia skręcenia określonej nici i liczby połączeń, i dla 38 różnych białek nieuporządkowanych.

W podsumowaniu stwierdzam, że przedstawiona do recenzji praca doktorska Pana mgr Radosta Waszkiewicza zatytułowana „Hydrodynamic techniques in the study of elastic macromolecules” prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w dyscyplinie fizyki miękkiej materii oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej.

Przedmiotem rozprawy doktorskiej jest oryginalne rozwiązanie problemu naukowego. W związku z powyższym wnioskuję o dopuszczenie Pana mgr. Radosta Waszkiewicza do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Almeida.