



CENTRUM BADAŃ MOLEKULARNYCH I MAKROMOLEKULARNYCH
Polskiej Akademii Nauk
Dział Funkcjonalnych Polimerów i Materiałów Polimerowych

ul. Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź

Profesor dr hab. Stanisław Słomkowski

Telefon: (42)-680-3253

Fax: (42)-680-3261

E-mail: stanislaw.slomkowski@cbmm.lodz.pl

***Recenzja osiągnięcia naukowego opisanego w cyklu powiązanych publikacji
zatytułowanego:***

***Określenie mechanizmów adsorpcji i właściwości monowarstw polipeptydów
na powierzchni substratów stałych***

Dr Marii Morgi

***w związku z postępowaniem wszczętym wskutek wniosku o nadanie
jej stopnia doktora habilitowanego
w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych,
w dyscyplinie nauki chemiczne***

Informacja formalna

Podstawą formalną recenzji jest pismo prof. dr. hab. Piotra Warszyńskiego, dyrektora Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN z 19.03.2024 informujące, że 7 marca 2024 decyzją Rady Naukowej IKiFP PAN zostałem powołany na recenzenta w sprawie nadania Pani dr Marii Mordze stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk chemicznych

***Ocena prac składających się na cykl publikacji stanowiących uzasadnienie postępowania
habilitacyjnego***

Podstawą ocenianego wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego Pani dr Marii Mordze jest cykl ośmiu powiązanych tematycznie i współzależnych, publikacji oryginalnych oraz jednego patentu dotyczących mechanizmu i kinetyki adsorpcji polipeptydów tworzących monowarstwy. Wybór wspomnianej wyżej tematyki badawczej jakiego dokonała Habilitantka ma mocne uzasadnienie zarówno ze względu na jej znaczenie w zrozumieniu podstawowych procesów zachodzących na granicy ciało stałe – roztwór makrocząsteczek jak i ze względu na ich znaczenie w wielu procesach biologicznych, medycznych i przemysłowych.

Już na wstępie pragnę stwierdzić, że po zapoznaniu się z pracami, które stanowią formalną podstawę osiągnięcia uzasadniającego wniosek o wszczęcie przewodu habilitacyjnego Pani dr Marii Morgi, nie mam wątpliwości, że mieści się ono w zakresie dyscypliny nauki chemiczne w obszarze, jaki obejmuje dziedzina nauki ścisłe i przyrodnicze.

Prace przeprowadzone przez Habilitantkę polegały przede wszystkim na wykorzystaniu metod fizykochemicznych, do zbadania procesów adsorpcji z roztworów w elektrolitach, polipeptydów syntetycznych (poli-L-lizyny i poliargininy) zakupionych w renomowanej firmie odczynnikowej (Sigma Aldrich Merck). Podłożami adsorbującymi były powierzchnie miki, kwarcu i krzemionki. Cechą charakterystyczną tych prac było wyczerpujące scharakteryzowanie makrocząsteczek polijonowych polipeptydów w roztworach oraz monowarstw wytwarzanych podczas ich adsorpcji na podłożach stałych. Do badań stosowano techniki wykorzystujące aparaty wytwarzane przemysłowo (np. aparat do badań dynamicznego rozproszenia światła, urządzenia do pomiarów elektroforetycznych, badań lepkości i inne, a także wagę kwarcową i mikroskopię sił atomowych). Jednak, na szczególną uwagę zasługują prace z wykorzystaniem urządzenia do badań przepływowych w tym elektrokinetycznych, umożliwiającego monitorowanie powstawania monowarstwy makrocząsteczek polipeptydów. Eksperymenty uzupełniały prace teoretyczne, w tym z wykorzystaniem modelowania komputerowego konformacji makrocząsteczek polipeptydów z wykorzystaniem algorytmów dynamiki molekularnej oraz kinetyki adsorpcji z wykorzystaniem metody RSA (random sequential adsorption).

Prace, które są podstawą rozprawy habilitacyjnej zostały opublikowane w latach 2015-2023. Wszystkie z nich są pracami wieloautorскими. Oświadczenia współautorów i wyjaśnienia Pani dr Marii Morgi i pozwoliły mi na zorientowanie się na czym w przypadku każdej z tych prac polegał udział Habilitantki w jej powstaniu. Co istotne, między tymi oświadczeniami nie ma sprzeczności. Wszystkie te prace zostały opublikowane w czasopiśmie z listy JCR (Journal Citation Reports). Wszystkie dotyczyły właściwości poli(L-lizyny) i poliargininy w roztworach elektrolitów oraz ich adsorpcji na powierzchniach miki, krzemu i kwarcu a także właściwości utworzonych polipeptydowych monowarstw. Nie mam wątpliwości, że wszystkie są związane tematycznie z deklarowanym osiągnięciem naukowym stanowiącym podstawę rozprawy.

Sumaryczna wartość parametru wpływu (IF), za rok, w którym została opublikowana praca, wynosi 33,635. Jej średnia wartość przypadająca na pracę to 4.20. Wartość parametru IF prac „cyklu habilitacyjnego” zawarta jest w zakresie od 2,829 do 6,700. Ponieważ uważam, że dane bibliometryczne powinny mieć jedynie charakter pomocniczy, w dalszej części przedstawię zwięzłą ocenę merytoryczną każdej z prac tworzących podstawę wniosku o przyznanie dr Marii Morgi stopnia doktora habilitowanego.

Pierwsza praca, oznaczona symbolem H1 (J. Colloid Interface Sci., **2015**, 456, 116-124; IF = 4,505) zawiera opis adsorpcji makrocząsteczek poli(L-lizyny) na powierzchni miki. Jej znaczenie polega na znalezieniu warunków tego procesu umożliwiających szybkie wytwarzanie monowarstw polipeptydu, przy czym adsorpcję badano w warunkach dynamicznych, w czasie przepływu roztworu poli(L-lizyny) nad powierzchnią adsorbującą.

Warto podkreślić, że przy odpowiednio wysokim stężeniu polipeptydu w przepływającym roztworze maksymalne pokrycie powierzchni następuje już po jednej minucie. Pełen opis układu uzupełniają wyniki badań kinetycznych procesu desorpcji. Zwróciłem uwagę na bardzo dobrą zgodność wyników doświadczalnych i przewidywań teoretycznych.

W następnej pracy (H2, Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp., **2017**, 529, 302–310; IF = 2,829) Habilitantka opisała wyniki badań porównawczych właściwości w roztworach oraz oraz procesów adsorpcji poli(L-lizyny), chlorowodoru polialiloaminy (PAH) i chlorku poli(dialilodimetyloamoniowego; PDDA). Są one szczególnie interesujące ponieważ pozwoliły na poznanie zależności energii adsorpcji od budowy chemicznej adsorbowanych polijonów. Dobór polijonów odniesienia był ciekawy również z tej przyczyny, że są one często stosowane do konstruowania wielowarstw polimerowych.

W pracy (H3, J. Phys. Chem. C, 2018, 122, 23180–23190; IF = 4,309) Pani dr Maria Morga przedstawiła wyczerpujący opis konformacji poli(L-lizyny) w roztworach elektrolitów oraz właściwości tych roztworów uzyskane na drodze modelowania komputerowego z zastosowaniem dynamiki molekularnej i starannie dobranych metod doświadczalnych. Pozwoliły one nie tylko na określenie kształtu i wielkości makrocząsteczki polipeptydu w roztworze lecz również parametrów makroskopowych charakteryzujących roztwory, w tym zależności gęstości roztworu od frakcji polipeptydu. Uzyskano wyniki opisujące roztwory poli(L-lizyny) zarówno w skali makroskopowej jak i w skali mikrometrycznej.

Może wydawać się zaskakujące, lecz badania o charakterze podstawowym wchodzące w skład cyklu „prac habilitacyjnych” bardzo szybko doprowadziły do ważnego rozwiązania praktycznego. Pozwoliły bowiem na określenie warunków, w których makrocząsteczki polijonów [np. poli(L-lizyny)] przyjmują konformacje nadające im kształt prętów. Znalezione również, że lepkość wewnętrzną roztworów cząsteczek o takich kształtach opisuje równanie Brennera. Na podstawie tych obserwacji powstała praca H5 (Polski Patent, 2021, PL 236792B1, Sposób wyznaczania masy molowej polielektrolitów liniowych, zwłaszcza polilizyny). Praca ta jest niebanalna, ponieważ dotychczasowe metody oznaczania mas molowych liniowych polielektrolitów są skomplikowane, bądź mało dokładne lub jedno i drugie.

Następna praca cyklu habilitacyjnego (H5, Langmuir, 2019, 35, 12042-12052; IF = 3,557) przedstawia wyniki badań kinetyki adsorpcji poli(L-lizyny) na powierzchni miki i stabilności powstających w tym procesie monowarstw. Badania poli(L-lizyny) w roztworze dostarczyły wyczerpujących informacji o zachowaniu się makrocząsteczek tego polimeru w ciekłym ośrodku ciągłym niezbędnych do modelowania ich adsorpcji i desorpcji przy różnych wartościach pH oraz właściwościach makrocząsteczek polipeptydu na powierzchni miki. Habilitantka uzyskała bardzo dobrą zgodność wyników eksperymentów i obliczeń teoretycznych, co świadczy o zastosowaniu właściwych modeli. Określono warunki, w których powstające monowarstwy poli(L-lizyny) są stabilne.

Kolejna praca (H6, J. Phys. Chem. C, **2020**, 124, 4571-4581; IF = 4,126) zawiera wyniki badań adsorpcji poli(L-lizyny) w istotnie innym układzie niż omawiane wcześniej. W tym wypadku podłożem adsorbującym była warstewka krzemionki wytworzona na powierzchni krzemu. Adsorpcja przebiegała w układzie przepływowym jednak o innej konstrukcji.

Modyfikacja pozwalała nie tylko na pomiar potencjału zeta adsorbującej powierzchni lecz również stopnia pokrycia metodą reflektometrii optycznej. Wyniki eksperymentów analizowano porównując je z wynikami obliczeń uzyskanymi przy założeniu adsorpcji makrocząsteczek zorientowanych przypadkowo w stosunku do powierzchni i założeniu, że są one zaadsorbowane w orientacji płasko-równoległej. Znacznie lepszą zgodność danych eksperymentalnych i obliczeniowych Habilitantka uzyskała przyjmując model płasko-równoległy.

Praca H7 (Int. J. Environ. Res. Public Health, **2022**, 19, 3588; IF = 4.614) zawiera wyczerpujący opis struktury i właściwości makrocząsteczek poliargininy w roztworze NaCl. Nie jest to praca szczególnie nowatorska. Uważam ją jednak za bardzo potrzebną. Poliarginina ze względu na swoją biodegradowalność i nietoksyczność może znaleźć zastosowania w farmacji i szerzej w medycynie. We wszystkich tych wypadkach wiedza o jej konformacjach w roztworach różniących się pH i mocą jonową będzie niezwykle użyteczna a do czasu opublikowania omawianej pracy informacji na ten temat było niewiele. Badania doświadczalne i modelowanie komputerowe przeprowadzone przez Panią Marię Morgę wypełniły tę lukę. W pracy H7 Habilitantka przedstawiła informacje o konformacjach makrocząsteczek tego polimeru, w tym o jego strukturze drugorzędowej oraz o ich wymiarach. Wyznaczone zostały takie parametry jak: współczynnik dyfuzji w roztworze, średnica hydrodynamiczna i ruchliwość elektroforetyczna a także ładunek elektrokinetyczny i stopień jonizacji. Praca zawiera więc najbardziej pełny zestaw informacji o poliargininie w roztworze prostego elektrolitu.

W pracy H8 (J. Phys. Chem. B, 2020, 124, 2961-2972; IF = 2,991) Pani Maria Morga opisała zależności od pH takich właściwości makrocząsteczek poli(L-lizyny) i poli(kwasu glutaminowego) jak: struktura drugorzędowa, konformacje łańcuchów i ładunek elektryczny. Ważnym wnioskiem z porównania danych uzyskanych z eksperymentów jest stwierdzenie, że żadna z zastosowanych metod użytych do modelowania nie daje prawidłowego opisu wszystkich cech badanych układów i wybierając metodę należy mieć na uwadze jakie parametry mają być wyznaczone.

Cykl habilitacyjny zamyka praca H9 (Appl. Surf. Sci., 2023, 615, 156331; IF = 6,700) zawierająca wyniki badań adsorpcji makrocząsteczek poli(L-lizyny) i poliargininy na powierzchni kwarcu. Obejmuje ona nie tylko charakterystyki makrocząsteczek polipeptydów w roztworze lecz również opis oddziaływań w jakich uczestniczą makrocząsteczki po zaadsorbowaniu, oddziaływań w istotny sposób wpływających na stabilność powstających monowarstw.

Podsumowując część recenzji poświęconą omówieniu osiągnięć Pani dr Marii Morgi, opisanych w publikacjach i patencie będących podstawą postępowania habilitacyjnego uważam, że stanowią one najbardziej wszechstronny, wyczerpujący i wiarygodny opis struktury i właściwości makrocząsteczek liniowych polipeptydów syntetycznych [poli(L-lizyny), i poliargininy], uzupełnionych badaniami poli(kwasu asparaginowego) i poli(kwasu glutaminowego) w roztworach prostych elektrolitów. Pani dr Maria Morga zrealizowała również badania adsorpcji polipeptydów na dobrze zdefiniowanych powierzchniach płaskich. W badaniach zastosowane zostały różne komplementarne lub weryfikujące techniki badawcze z wykorzystaniem zarówno komercyjnie dostępnej aparatury jak i urządzeń skonstruowanych

w zespole macierzystym (urządzenie przepływowe do pomiaru potencjału zeta powierzchni płaskich metodą elektrokinetyczną i jego wariantu umożliwiającego dodatkowo oznaczenie stopnia pokrycia adsorbującej powierzchni makrocząsteczkami polipeptydów metodą reflektometrii optycznej. Na uwagę zasługuje również opracowanie oryginalnej, chronionej patentem, metody oznaczania mas molowych polipeptydów. Równolegle z badaniami eksperymentalnymi Habilitantka prowadziła prace teoretyczne z zastosowaniem analizy matematycznej i modelowania komputerowego metodami dynamiki molekularnej, przy czym wyniki modelowania komputerowego były walidowane doświadczalnie.

Ocena dorobku naukowego habilitantki, niezwiązanego bezpośrednio z osiągnięciem naukowym stanowiącym podstawę postępowania habilitacyjnego

Na dorobek publikacyjny, jaki stanowią prace, których dr Maria Morga nie włączyła do cyklu habilitacyjnego składa się:

Przed uzyskaniem stopnia doktora: 11 publikacji znajdujących się w bazie Journal Citation Reports (JCR), i 1 opublikowana w czasopiśmie spoza bazy JCR.

Po uzyskaniu stopnia doktora: 23 w czasopismach z bazy JCR i 1 w czasopiśmie spoza tej bazy. Łączny dorobek publikacyjny po uzyskaniu stopnia doktora obejmujący prace z bazy JCR włączone i nie włączone do cyklu habilitacyjnego wynosi 31. W stosunku do liczby prac (baza JCR) opublikowanych przed doktoratem (12) zwiększył się on znacznie.

Na dorobek naukowy Habilitantki składają się również prezentacje konferencyjne. Wśród nich 25 to prezentacje ustne (12 przed i 13 po uzyskaniu stopnia doktora) oraz 50 prezentacji plakatowych (łącznie przed i po uzyskaniu stopnia doktora).

W sumie, uważam, że dorobek naukowy, którego Habilitantka nie włączyła do cyklu prac stanowiących podstawę habilitacji jest znaczny i łącznie z prezentacjami konferencyjnymi odpowiada oczekiwaniom wobec kandydatki/kandydata do stopnia doktora habilitowanego.

Wartościowy dorobek naukowy Habilitantki stanowi również patent, którego jest współautorką.

Działalność dydaktyczna

Dokonując oceny aktywności dydaktycznej Pani dr Mari Morgi trzeba pamiętać o specyficznej sytuacji pracowników instytutów Polskiej Akademii Nauk. Instytuty PAN nie prowadziły i nie prowadzą nauczania na poziomie I i II. Obecnie same nie mogą również prowadzić nauczania na poziomie III. Szkoły doktorskie mogą jedynie współtworzyć jako partnerzy uczelni. Pracownicy instytutów PAN są zaangażowani w specyficzne formy aktywności dydaktycznej. Działalność Pani dr Marii Morgi jest tego dobrym przykładem. Przygotowywała ścieżki dydaktyczne i eksperymenty dla uczniów szkół podstawowych na zajęcia w ramach drzwi otwartych Instytutu, uczestniczyła aktywnie w Festiwalach Nauki, opiekowała się stażystami organizując ich zajęcia w Instytucie Katalizy i Chemii Powierzchni im. Jerzego Habera, była promotorem pracy inżynierskiej. Stażyści, których pracę organizowała i nad którą sprawowała nadzór merytoryczny odbywali staże krótko i średnioterminowe.

Działalność organizacyjna i naukowo organizacyjna

Pani dr Maria Morga prowadziła działalność organizacyjną w istotny sposób związaną z możliwościami rozwoju pracy badawczej. Wart podkreślenia jest udział Habilitantki w ośmiu projektach finansowanych ze środków pozyskiwanych na drodze konkursu (NCN, NCBiR, Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego). Kierowała jednym z nich a w siedmiu była wykonawczynią. Współpracowała z firmą Elektro Med. Habilitantka współpracowała z zespołami badawczymi CBMiM PAN, Uniwersytetu Jagiellońskiego i Politechniki Krakowskiej a także zagranicznych instytucji naukowych, w tym w Federalnym Instytucie Badań i Testowania Materiałów (BAM) w Berlinie i zespołem z Uniwersytetu w Genewie. Wszystkie te formy współpracy wymagały odpowiedniej bieżącej działalności organizacyjnej.

Aktywność naukowa realizowana w więcej niż jednej uczelni naukowej, w szczególności zagranicznej

Ustawa *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z 20 lipca 2018 wymaga od kandydata/kandydatki, który(a) ubiega się o stopień doktora habilitowanego, aby podczas swojej kariery zawodowej zdobył doświadczenie w wyniku badań naukowych realizowanych w więcej niż jednej uczelni lub instytucji badawczej, w szczególności zagranicznej. Spełnienie tego wymogu ma na celu sprzyjanie poszerzaniu wiedzy najczęściej młodych pracowników naukowych o tematyce, metodach i organizacji badań w innych zespołach niż zespoły w macierzystej instytucji. Doświadczenie zdobyte podczas pracy w tych zespołach powinno mieć istotny wpływ na sposób uprawiania nauki przez badacza, który wraz ze stopniem doktora habilitowanego uzyskuje prawa do w pełni samodzielnej pracy naukowej i formalne uprawnienia do kierowania zespołami badawczymi. W otrzymanych materiałach nie znalazłem informacji aby Habilitantka odbyła staż długoterminowy. Natomiast zauważyłem, że odbyła kilka staży średnio i krótkoterminowych, w tym we wspomnianym instytucie BAM, na Uniwersytetach w Genewie (Szwajcaria) i w Aalto (Finlandia) spełniając w ten sposób wymóg ustawowy.

Podsumowanie

Moja ocena wszystkich elementów rozprawy habilitacyjnej dr Marii Morgi jest szczególnie pozytywna. Jej największe osiągnięcie naukowe zostało opisane w ośmiu publikacjach i jednym patencie, które stanowią podstawę rozprawy. Ich ocenę zamieściłem już wcześniej w tym miejscu podkreślając ponownie, że uważam je za obecnie najlepszy i najbardziej wyczerpujący i wiarygodny opis układów syntetyczne polipeptydy-ciekły elektrolit stały substrat.

Uważam również, że na dorobek naukowy niewłączony przez Habilitantkę do rozprawy składają się bardzo dobre publikacje.

Z satysfakcją stwierdzam, że współpraca Pani dr Marii Morgi z pracownikami z innych zespołów doprowadziła do wartościowych publikacji.

Biorąc pod uwagę wszystkie aspekty ocenianej rozprawy habilitacyjnej uważam, że w pełni spełnia ona wymagania określone w ustawie *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z 20 lipca 2018 roku i w komisji do sprawy przewodu habilitacyjnego będę głosował za rekomendowaniem Radzie Naukowej Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN podjęcie kroków w celu nadania dr. Marii Mordze stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.

Łódź, 9 czerwca 2024

A handwritten signature in blue ink, appearing to read 'H. Kowalczyk', is written over a faint, light blue rectangular stamp.