

Piotr Zielenkiewicz

Instytut Biochemii i Biofizyki PAN

Uniwersytet Warszawski, Wydział Biologii

### Recenzja

w postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego **dr Adolfo Poma Bernaoli**  
dla Rady Naukowej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki Polskiej Akademii Nauk

Pan Adolfo Poma Bernaola jest fizykiem. Magisterium z fizyki uzyskał na State University of Campinas w Sao Paulo w Brazylii. Tematem magisterium była „Symulacja atomistyczna rzadkich zdarzeń poprzez próbkowania ścieżki przejścia”. Praca ta została wykonana na Wydziale Fizyki Materii Skondensowanej. Następnie rozpoczął studia doktoranckie na Uniwersytecie Johanna Gutenberga w Moguncji, wykonując pracę doktorską w Instytucie Maxa Plancka Badań nad Polimerami, zakończone w 2011 roku obroną rozprawy pod tytułem „Gruboziarnistość i kwantowo klasyczne sprzężenie adaptacyjne w materii miękkiej”. Promotorami przewodu byli prof. Kurt Kremer oraz prof. Luigi Dell’Olio.

Przez dwa kolejne lata był zatrudniony jako post-doc w Instytucie Fizyki Uniwersytetu Rzymskiego "La Sapienza", a następnie jako adiunkt kolejno w IFPAN, Politechnice Łódzkiej i, od 2018 roku do chwili obecnej, w Zakładzie Biosystemów i Materii Miękkiej Instytutu Podstawowych Problemów Techniki PAN.

Dr. Adolfo Poma przedstawił osiągnięcie habilitacyjne pt. "Symulacje dynamiki molekularnej dużych zmian konformacyjnych biomolekuł: Procesy samoskładania i nanomechanika białek w zastosowaniach w badaniu chorób SARS-CoV-2 i Alzheimer".

Osiągnięcie stanowi zestaw ośmiu opublikowanych w czasopiśmie angielskojęzycznych prac naukowych. Pierwszych pięć prac przedstawia wykorzystanie modeli gruboziarnistych i wkład Autora w rozwój metodologii modelowania gruboziarnistego i jego porównania z symulacjami pełnoatomowymi do badania systemów biomolekularnych składających się z różnego rodzaju komponentów takich jak np. białka, cukry oraz ich kompleksy. W trzech pozostałych artykułach [A6 do A8] przedstawiono badania nanomechaniki wybranych kompleksów, istotnych dla chorób takich jak COVID-19 i choroba Alzheimer. W pracach tych koncentruje się habilitant na stabilności kompleksów i jej roli w epidemiologii lub rozwoju danej choroby.

W pierwszej pracy [A1] Autorzy przedstawiają wyniki symulacji, metodą dynamiki molekularnej, procesu samoorganizacji mikrowłókien celulozy. Dwie, 60ns trajektorie z krokiem czasowym 2fs, pozwoliły na charakterystykę oddziaływań pomiędzy pojedynczymi włóknami a oligomerami prowadzących do tworzenia celulozy I beta i na określenie zależności tego procesu od długości łańcucha i siły oddziaływań hydrofilowych. Opracowanie metodologii pozwalającej na użycie gruboziarnistego modelu MARTINI3 i zmodyfikowanego modelu celulozy pozwoliło na wydłużenie poszczególnych produkcyjnych symulacji do 100 ns i osiągnięcie limitu symulacji budowy ściany komórkowej roślin. Inną wartością zaproponowanych zmian jest otwarcie możliwości obliczeń z uwzględnieniem oddziaływań z innymi składnikami układu (białka, lipidy, cukry itp.). Kolejną iteracją, omówioną w publikacji [A3], jest rozwinięcie modelu gruboziarnistego przy użyciu reprezentacji typu Go. Wyzwanie przeprowadzenia symulacji kompleksów białko-polisacharyd wymagało opisu zapewniającego ramy dla ujednoliconego podejścia do układów polisacharydowo-białkowych zawierających efektywne atomy, które odpowiadają grupom o porównywalnej wielkości. Budowa nowego modelu została przeprowadzona w pracowni profesora Marka Cieplaka, od lat specjalizującego się w modelach typu Go. Nic więc dziwnego, że weryfikacja na przykładzie kompleksu katalizatorowego heksozy-Man5B, zarówno eksperymentalna jak również w porównaniu z symulacjami pełnoatomowymi dynamiki molekularnej, wypadła dla modelu znakomicie. Model taki został sparametryzowany dla celulozy na podstawie pełnoatomowych symulacji MD, jak opisano w publikacji [A4]. Model gruboziarnisty oparty na podejściu Go zastosowano także w pracy [A5] do charakteryzacji nanomechanicznej dużych włókien celulozy oraz beta amyloidów. Porównanie wyników symulacji z dostępnymi eksperymentami potwierdziło stosowalność zbudowanego modelu do opisu nanomechanicznych właściwości dużych systemów białkowych i cukrowych. W publikacji [A6] przedstawiano badania struktury, stabilności i charakterystyki energetycznej białka S domeny RBD wirusów SARS-CoV-1 i SARS-CoV-2 na podstawie analiz trajektorii dynamiki molekularnej. Rozwinięciem tego nurtu badań jest praca [A7], w której określono różnicę energii swobodnej pomiędzy konformacjami otwartymi a stanem całkowicie zamkniętym białka S (tj. takim, w którym żaden monomer w trimerze nie występuje w konformacji „up” wymaganej do interakcji białka S z receptorem ACE2). Istotne w chorobie Alzheimer, peptydy Abeta-42 i Abeta-40 oraz ich właściwości agregacyjne zbadano symulacyjnie, przy wykorzystaniu zmodyfikowanego modelu Go, w procesie nano-nakłuwania i opisano w publikacji [A8]. Uzyskane wyniki dostarczają cennych informacji o mechanizmie wzrastania stabilności z rozmiarem włókien peptydów Abeta i są zgodne z wynikami badań metodą mikroskopii sił atomowych.



W podsumowaniu stwierdzam, że przedstawione przez dr Adolfo Poma osiem publikacji stanowi spójne osiągnięcie zgodne z tytułem przedstawionej rozprawy habilitacyjnej. Prace habilitanta zostały opublikowane w dobrych i bardzo dobrych czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Z faktu, że jest habilitant autorem korespondencyjnym wszystkich ośmiu prac oraz z oświadczeń współautorów wynika jego dominujący wkład do przedstawionych prac. Opisane w nich badania habilitanta stwarzają nowe możliwości symulacji układów biomolekularnych i jako takie stanowią istotny wkład do inżynierii biomedycznej.

Pozostałe osiągnięcia dr Poma to 12 publikacji w czasopismach o zasięgu międzynarodowym i współautorstwo jednego rozdziału w książce wydanej w 2022 roku przez wydawnictwo Springer US. W pięciu z tych publikacji jest dr Poma autorem korespondencyjnym.

Prace habilitanta były cytowane ponad 800 razy, a jego indeks Hirscha wynosi 16, a więc jest wysoki jak na ten etap kariery naukowej.

Jest ponadto współautorem siedmiu abstraktów konferencyjnych. Wygłosił 24 wykłady i seminaria na zaproszenie w Polsce, Europie i USA.

Dr Poma był kierownikiem dwóch projektów NCN i uczestniczył jako wykonawca w dwóch projektach europejskich kierowanych przez Prof. Marka Cieplaka.

Pełni funkcje eksperckie w EU, NCN, akcji COST, FNP i Uniwersytecie św. Marka w Peru.

Jest także edytorem trzech czasopism naukowych, w tym edytorem akademickim w Journal of Structural Biology.

Był recenzentem prac w ponad 20 czasopismach naukowych.

W podsumowaniu stwierdzam, że opisane w rozprawie habilitacyjnej osiągnięcie naukowe dr **Adolfo Poma Bernaoli** stanowi istotny wkład do inżynierii biomedycznej, a całokształt Jego działalności naukowej spełnia z naddatkiem ustawowe i zwyczajowe wymagania do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego.



Warszawa, 03 czerwca 2024 r.