



Bydgoszcz 15.04.2024 r.

Ocena dorobku naukowego dr Piotra Kawczaka będącego podstawą postępowania habilitacyjnego pt. „Zastosowanie ilościowych zależności struktura-aktywność/właściwości (QSAR/QSPR) oraz modelowania molekularnego w oparciu o wybrane kwantowo-chemiczne metody obliczeniowe ab initio i półempiryczne w ocenie aktywności farmakologicznej i klasyfikacji różnych grup związków biologicznie aktywnych

Dr n. farm. Piotr Kawczak ukończył kierunek farmacja w 2003 roku na Wydziale Farmaceutycznym Akademii Medycznej w Gdańsku, uzyskując tytuł zawodowy magistra farmacji. W tej samej jednostce w 2008 roku uzyskał stopień doktora nauk farmaceutycznych na podstawie rozprawy doktorskiej „Zastosowanie wysokosprawnej chromatografii cieczowej (HPLC) do szybkiego przesiewowego oznaczania kwasowości i lipofilowości substancji biologicznie aktywnych”, pod kierunkiem prof. dr hab. Antoni Nasala. Od 2010 roku jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w Katedrze i Zakładzie Chemii Farmaceutycznej, Wydziału Farmaceutycznego, Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego.

Osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę postępowania habilitacyjnego dr Piotra Kawczaka zostało przedstawione w postaci monotematycznego cyklu 10 oryginalnych publikacji (H1-H10) opublikowanych w latach 2012-2020. Powyższe artykuły habilitanta zostały opublikowane w czasopismach o umiarkowanym stopniu oddziaływania w przedziale IF 0,719-2,464 z zakresu komputerowego modelowania struktur leków, chemii medycznej oraz zależności struktura-aktywność. Jest to 6 czasopism z wydawnictwa Bentham Science Publishers, 3 ze Springer oraz 1 czasopismo z wydawnictwa MDPI. Analiza bibliometryczna wykazała łączny współczynnik IF wynoszący 14,421 oraz 265 pkt MNiSW z łączną liczbą cytowań 62 (Scopus).

Wartym podkreślenia jest fakt pierwszego autorstwa habilitanta w 8 publikacjach z czego w 7 był również autorem korespondencyjnym. Zaprezentowany cykl publikacji zawiera stały skład trzech współautorów a kierownik Katedry i Zakładu Chemii Farmaceutycznej prof. Tomasz Bączek potwierdził znaczący wkład dr Piotra Kawczaka w powstanie publikacji, przypisując pozostałym współautorom wkład w pomysł i nadzór merytoryczny oraz wykonanie obliczeń w programie Gaussian.

Studiując osiągnięcie naukowe dotyczące zastosowanie ilościowych zależności struktura-aktywność/właściwości (QSAR/QSPR) oraz modelowania molekularnego nasuwają się najważniejsze etapy i efekty ww. osiągnięcia:

- badania aktywności struktura-aktywność dla serii związków amidowych pochodnych kwasu 2-furanokarboksyłowego i 2-tiofienokarboksyłowego poparta wynikami aktywności antyproliferacyjnej dla komórek A431

- zaproponowanie wybranych parametrów strukturalnych dla powszechnie stosowanych anestetyków wziewnych odgrywających istotną rolę w ich skutecznym oddziaływaniu na znieczulenie ogólne u myszy

- wytypowanie parametrów takich jak energia wiązania, ciepło tworzenia oraz całkowity moment dipolowy determinujących aktywność biologiczną związków miejscowo znieczulających.

- wyselekcjonowanie parametrów charakteryzujących polaryzowalność i objętość cząsteczkową mających determinujących aktywność symatykolityczną oraz sympatomimetyczną badanych związków

- wykazanie złożonego wpływu deskryptorów molekularnych na aktywność hamującą wzrost drobnoustrojów wybranych flurochinolonów

- wskazanie wspólnych i różnicujących parametrów fizyko-chemicznych wpływających na aktywność przeciwdrobnoustrojową wybranej grupy sulfonamidów

- analiza wybranej grupy antybiotyków beta-laktamowych, aminoglikozydowych i tetracyklinowych pod kątem różnych elementów strukturalnych i geometrycznych determinujących ich aktywność wobec mikroorganizmów

- wykazanie zależności oddziaływań elektrostatycznych na aktywność biologiczną oraz wybranych deskryptorów molekularnych na aktywność chemioterapeutyczną badanych analogów zasad kwasów nukleinowych

Jak już wyżej podkreślono wkład habilitanta w powyższe osiągnięcie jest znaczący. Przeprowadzone badania miały charakter prac obliczeniowych w obszarze QSAR z wykorzystaniem odpowiednio wygenerowanych deskryptorów na drodze chemii kwantowej, metod półempirycznych oraz mechaniki molekularnej. Dr Piotr Kawczak wykazał się umiejętnością wykorzystania dostępnych metod chemometrycznych, które wraz ze wsparciem merytorycznym współautorów stanowią potwierdzenie istotności badań QSAR w zakresie przewidywania aktywności i klasyfikacji farmakologicznej oraz fizykochemicznej badanych związków. W badaniach wykorzystał dane retencji uzyskane z chromatografii cieczowej oraz aktywność biologiczną związków i leków pochodzących z różnych grup z układu ATC. Osiągnięcie posiadałoby większą wartość gdyby na podstawie wypracowanego modelu zaproponować struktury i następnie przebadać je w warunkach *in vitro* celem zweryfikowania zdolności predykcyjnej. Pomimo mojej uwagi, osiągnięcie opisane cyklem monotematycznych publikacji H1-H10 spełnia ustawowy warunek wskazany w art. 219 ust. 1, p. 2 ustawy.

Zgodnie z zaleceniami poradnika RDN dotyczącymi przewodów i awansów naukowych, jest konieczność wykazania się co najmniej dwoma osiągnięciami. W tej sytuacji za możliwe jest wskazanie jako drugiego osiągnięcia - 3-miesięcznego stażu naukowego (2004) pana dr Piotra Kawczaka na Wolnym Uniwersytecie w Brukseli (Department of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, pod kierunkiem prof. Yvana Vander Heydena) w tematyce zastosowania micelarnej chromatografii cieczowej (MCC) oraz zastosowaniu monolitycznych kolumn w analizie chromatograficznej. Te osiągnięcie całościowo zamyka publikacja w czasopiśmie *Journal of Separation Sciences* (2010, 33) opisująca zastosowanie MCC do wyznaczania lipofilowości wybranej grupy związków, której współautorem jest m.in. opiekun stażu. Osiągnięcie to jest również spełnieniem wymogu dotyczącego wykazania istotnej aktywności naukowej realizowanej poza uczelnią macierzystą. Na wzmocnienie uzasadnienia tego kryterium należy wspomnieć dodatkowo o 9-miesięcznym stażu doktoranckim w Holandii – Avans University of Professional Education w Bredzie (opiekun dr Henk Claessens) oraz 2-letnim (2008-2010) stażu podoktorskim w Stanach Zjednoczonych – Department of Pharmaceutical Sciences, State University of New York at Buffalo (opiekun prof. Wiliam Jusko), podczas którego brał udział w projektach z zakresu modelowania PK/PD leków układu krwiotwórczego. Warto również wspomnieć o współpracy naukowej habilitanta z przemysłem – Zakładami Farmaceutycznymi Polpharma SA, udokumentowanej publikacjami w tematyce QSAR.

Dr Piotr Kawczak w latach 2010-2013 był współwykonawcą grantu MNiSW dotyczącego „Usprawnienia rozdzielania peptydów w proteomice z wykorzystaniem wysokosprawnej chromatografii cieczowej z gradientem pH”. Natomiast pełnił rolę kierownika projektu badawczego (2014) finansowanego w ramach Krajowego Naukowego Ośrodka Wiodącego (KNOW)

Reasumując, dorobek naukowy habilitanta dotyczy głównie badań QSAR ale powiązany jest również z wykonywanym zawodem farmaceuty. Bazując na załączonym wykazie publikacji (biblioteka) oraz analizie bibliometrycznej całkowity dorobek naukowy dr Piotra Kawczaka obejmuje 29 prac oryginalnych oraz 3 poglądowe o sumarycznej wartości współczynnika oddziaływania IF wynoszącym 69,058 oraz 1243 punktów KBN/MNiSW. Dorobek naukowy po uzyskaniu stopnia doktora obejmuje 27 prac oryginalnych oraz 2 prace poglądowe o sumarycznej wartości współczynnika oddziaływania IF wynoszącym 60,778 oraz 1195 punktów KBN/MNiSW. Jest również współautorem 2 rozdziałów w monografiach oraz 2 prac popularnonaukowych. Ponadto jest autorem i współautorem 25 streszczeń zjazdowych krajowych i zagranicznych. Całkowita liczba cytowań (bez autocytowań) wynosi 366, indeks Hirscha (h-index) 11 (Scopus).

Dr Piotr Kawczak od początku zatrudnienia związany jest Katedrą i Zakładem Chemii Farmaceutycznej, gdzie również prowadzi działalność dydaktyczną w formie wykładów, seminariów i ćwiczeń laboratoryjnych z przedmiotu Chemia farmaceutyczna, wykładów i seminariów z Ekonomiki zarządzania w farmacji, Postaw projektowania leków, Propedeutyki praktyki farmaceutycznej, Biotechnologii farmaceutycznej oraz Farmacji przemysłowej. Prowadzi również zajęcia na anglojęzycznym kierunku Master of Pharmacy.

Oprócz działalności organizacyjnej na macierzystym wydziale wykazał się również aktywnością popularyzatorską reprezentując Katedrę Chemii Farmaceutycznej podczas Medycznego Dnia Nauki w Ramach Bałtyckiego Festiwalu Nauki jak również corocznych Pikników na Zdrowie czy Otwartych Drzwi na Gdańskim Uniwersytecie Medycznym.

Podsumowując stwierdzam, że przedstawione osiągnięcia naukowe opisane w cyklu 10 monotematycznych publikacji oraz pozostałe osiągnięcia spełniają ustawową przesłankę określoną w art. 219 i stanowią znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki farmaceutycznej. Wnioskuje o dopuszczenie dr Piotra Kawczaka do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego

Kierownik
Katedry Chemii Leków

prof. dr hab. Michał Marszał