



Poznań, 19.08.2024 r.

Recenzja dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego

dr. Rafała Szabli

**w związku z ubieganiem się o nadanie stopnia doktora habilitowanego w
dyscyplinie nauki chemiczne na podstawie przedstawionego osiągnięcia naukowego**

pt.:

**„Określenie roli promieniowania UV w prebiotycznej syntezie i
selekcji komponentów RNA i DNA z wykorzystaniem metod
chemii obliczeniowej”**

1. Dane formalne

Podstawą formalną do przygotowania niniejszej recenzji jest uchwała nr 859/48/RDND10/2021-2024 Rady Dyscypliny Naukowej Nauki Chemiczne Politechniki Wrocławskiej z dnia 19. czerwca 2024 r. w sprawie powołania komisji do przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego dr. Rafała Szabli, zatrudnionego na etacie adiunkta na Wydziale Chemicznym Politechniki Wrocławskiej. Dokumentacja, której głównym elementem jest osiągnięcie naukowe zaprezentowane w formie cyklu powiązanych tematycznie piętnastu artykułów naukowych pod tytułem „*Określenie roli promieniowania UV w prebiotycznej syntezie i selekcji komponentów RNA i DNA z wykorzystaniem metod chemii obliczeniowej*”, została oceniona zgodnie z wymogami określonymi w art. 219 ust. 1 punkt 2 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 r. (Dz. U. z dnia 10 marca 2023 r., poz. 742 z późn. zm.).



2. Ocena merytoryczna

Autoreferat habilitacyjny (wraz z pozostałą dokumentacją) przygotowany przez Dr. Rafała Szablę stanowi imponujące i kompleksowe opracowanie, które odzwierciedla głęboką wiedzę habilitanta w dziedzinie chemii obliczeniowej oraz jej zastosowań w chemii prebiotycznej. Zbiór piętnastu prac naukowych (stanowiący Osiągnięcie naukowe zgodnie z ww. artykułami Ustawy) ma bez wątpienia znaczącą wartość naukową, w którym habilitant jako autor wiodący zajmuje się fundamentalnym pytaniem w badaniach nad początkiem życia: rolą promieniowania ultrafioletowego (UV) w prebiotycznej syntezie i selekcji podstawowych składników RNA i DNA.

Osiągnięcie naukowe Dr. Szabli wyróżnia się wysoką oryginalnością, w ramach którego szczegółowo przebadano warunki prebiotyczne, w których mogłyby powstać i ewoluować budulce życia. Podejście zastosowane przez autora, łączące zaawansowane metody chemii obliczeniowej z eksperymentami spektroskopii czasowo-rozdzielczej, pozwala na szczegółowe zrozumienie fotochemicznych szlaków, które mogły prowadzić do formowania nukleozydów i nukleotydów na wczesnych etapach życia na Ziemi. Jest to nowatorski wkład w tę dziedzinę, łączący przewidywania teoretyczne z obserwacjami eksperymentalnymi, co stanowi istotną lukę w dotychczasowych badaniach. Habilitant przedstawił 15 kluczowych publikacji, które składają się na jego osiągnięcie naukowe. Artykuły te zostały opublikowane w renomowanych czasopismach naukowych, co świadczy o ich wysokiej jakości oraz znaczeniu w środowisku naukowym. Całkowity IF (*impact factor*) tych publikacji wynosi 245,00, a liczba cytowań (bez autocytowań) osiąga imponującą wartość 557, co dodatkowo potwierdza, że prace habilitanta cieszą się szerokim uznaniem i wpływem na dalsze badania w tej dziedzinie (na dzień pisania niniejszej recenzji łączna liczba cytowani prac dr Szabli wynosi 954, a indeks H = 19 (wg Google Scholar)). Seria publikacji naukowych składających się na osiągnięcie naukowe (zwięzle opisanych w autoreferacie habilitacyjnym), zwłaszcza tych opublikowanych w czasopismach o wysokim tzw. współczynniku wpływu (*impact factor*, IF), takich jak



Nature, *Nature Communications* oraz *Journal of Physical Chemistry Letters*, doskonale ilustruje innowacyjny charakter badań dr. Szabli. Szczególnie wyróżniają się prace dotyczące fotodynamiki alternatywnych zasad DNA oraz roli promieniowania UV w prebiotycznych procesach chemicznych, które mają duże znaczenie w kontekście zrozumienia molekularnych mechanizmów prowadzących do powstania życia. Chciałbym szczególnie wyróżnić sposób, w jaki habilitant opisuje znaczenie czasów życia stanów wzbudzonych, w szczególności ich wpływu na fotostabilność chromoforów organicznych. Habilitant przystępnie wyjaśnia, że czasy życia w stanie wzbudzonym są jednymi z kluczowych parametrów mierzalnych spektroskopowo, pozwalającymi ocenić, jak stabilne są te cząsteczki pod wpływem promieniowania. Wskazuje, że krótkie czasy życia (rzędu pikosekund lub mniej) zapobiegają uczestniczeniu cząsteczek w destruktywnych reakcjach dwucząsteczkowych, co chroni je przed degradacją. Z kolei długie czasy życia stanów wzbudzonych zwiększają prawdopodobieństwo zajścia takich reakcji, co może prowadzić do powstawania nowych fotoproduktów lub degradacji molekuł. Ten fragment autoreferatu jest doskonałym przykładem na to, jak habilitant potrafi w klarowny i zrozumiały sposób przedstawić skomplikowane zależności fotochemiczne. Przedstawienie zależności między czasem życia w stanie wzbudzonym a stabilnością chemiczną cząsteczek jest nie tylko naukowo poprawne, ale także edukacyjne, co świadczy o umiejętnościach dydaktycznych autora. Dzięki temu opisowi czytelnik z łatwością zrozumie, jakie mechanizmy prowadzą do ochrony lub degradacji molekuł pod wpływem promieniowania UV, co jest kluczowe dla zrozumienia procesów prebiotycznych i fotochemicznych.

Publikacje stanowiące osiągnięcie naukowe habilitanta dotyczą szerokiego zakresu zagadnień, począwszy od eksperymentów spektroskopowych dotyczących chromoforów bioorganicznych, poprzez badania nad fotostabilnością prekursorów RNA, aż po zaawansowane studia nad mechanizmami fotorelaksacji fragmentów biomolekularnych. Dr Szabla w swoich pracach wykazał się nie tylko doskonałą znajomością nowoczesnych

metod kwantowo-chemicznych, ale również umiejętnością ich zastosowania do rozwiązania kluczowych problemów w dziedzinie fotochemii i chemii prebiotycznej.

Z obowiązku recenzenta muszę jednak wspomnieć o kilku, być może nie do końca uzasadnionych, wątpliwościach które zastanowiły mnie podczas zapoznawania się z osiągnięciem habilitacyjnym dr. Szabli. Za pewien mały problem uważam ilość publikacji stanowiących osiągnięcie – wydaje mi się, że można by nieco ograniczyć ilość tych prac, tym bardziej, że odnoszę wrażenie, że wbrew deklaracji habilitanta nie we wszystkich z piętnastu prac Jego rolę można uznać za wiodącą. Przykładem są tu prace H7 i H8 opublikowane odpowiednio w *Nature Communications* i *Nature*, w których dr Szabla nie wydaje się być autorem wiodącym, co stoi w pewnej sprzeczności z deklaracją habilitanta zawartą w autoreferacie (o Jego wiodącej roli we wszystkich 15 pracach wchodzących w skład osiągnięcia). W pracy H8 (9 autorów) obliczeniami teoretycznymi, zgodnie z zawartą w pracy deklaracją *Authors contributions*, zajmowało się, obok habilitanta, dwóch innych współautorów. Z drugiej strony nie mam wątpliwości, że wkład dr. Szabli w powstanie powyższych prac był znaczny i rozumiem doskonale pokusę wykazania tych „wysokopunktowych” prac w swoim osiągnięciu naukowym.

Należy podkreślić, że dr Rafał Szabla nie tylko wniósł znaczący wkład do rozwoju swojej dyscypliny naukowej, ale także z powodzeniem realizował projekty badawcze, w których pełnił rolę kierownika. Realizacja projektów finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki, w tym projektów OPUS, SONATA BIS oraz SONATA, jest dowodem na jego zdolność do zarządzania złożonymi projektami badawczymi oraz zdobywania środków finansowych na ich realizację. Wykazane w opisie ww. projektów miejsca rankingowe są imponujące, a znalezienie się w „Top 10” w 3 konkursach NCN nie może być dziełem przypadku.

Dr Szabla wykazuje się także ponadprzeciętną aktywnością międzynarodową, co jest kolejnym ważnym atutem w jego karierze naukowej. Doświadczenie zdobyte za granicą

obejmuje zarówno wieloletnie zatrudnienie na prestiżowych uczelniach, jak i udział w międzynarodowych projektach badawczych oraz krótkich wizytach w czołowych ośrodkach naukowych na świecie. W latach 2012–2017 habilitant realizował studia doktoranckie na Uniwersytecie Masaryka w Brnie oraz pracował w Instytucie Biofizyki Czeskiej Akademii Nauk. Już na tym etapie kariery zdobył cenne doświadczenie w międzynarodowym środowisku naukowym. Następnie, w latach 2017–2019, habilitant odbył prestiżowy staż podoktorski w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk, finansowany przez międzynarodowy grant *Simons Collaboration on the Origins of Life Postdoctoral Fellowship*. Dalszym etapem międzynarodowej kariery habilitanta było zatrudnienie jako wykładowca na Uniwersytecie w Edynburgu, gdzie od października 2019 do maja 2021 prowadził zajęcia z chemii organicznej oraz promował studentów na różnych poziomach kształcenia. Stanowisko to, na którym uzyskał status *tenured*, świadczy o jego wysokich kwalifikacjach oraz zaufaniu, jakim obdarzono go na renomowanej brytyjskiej uczelni. Ponadto, habilitant brał udział w licznych krótkich wizytach badawczych w czołowych instytucjach naukowych, takich jak Harvard University, ETH Zurich, Technical University Munich czy MRC Laboratory for Molecular Biology w Cambridge. Wizyty te pozwoliły na nawiązanie i rozwijanie współpracy badawczej oraz wymianę doświadczeń z wybitnymi specjalistami w dziedzinie chemii, fizyki i astrobiologii. Efektem tych międzynarodowych kontaktów są liczne publikacje powstałe we współpracy z zagranicznymi naukowcami, co dodatkowo podkreśla aktywność habilitanta na arenie międzynarodowej. Podsumowując, międzynarodowa aktywność habilitanta jest imponująca i świadczy o jego zdolności do współpracy w globalnym środowisku naukowym, co znacząco przyczynia się do rozwoju jego kariery i wzmacnia jego pozycję w świecie nauki.

3. Zastosowane metody badawcze

Dr Szabla wykazuje się dużą biegłością w stosowaniu zaawansowanych technik chemii obliczeniowej. Jego prace charakteryzują się precyzyjnym podejściem do modelowania procesów fotochemicznych oraz głębokim zrozumieniem mechanizmów kwantowo-

mechanicznych leżących u podstaw tych procesów. Habilitant jest uznanym ekspertem w dziedzinie obliczeń kwantowo-chemicznych, które stanowią kluczowy element w analizie mechanizmów fotorelaksacji fragmentów biomolekularnych. Jego praca obejmuje zaawansowane metody kwantowo-chemiczne, takie jak CASSCF i ADC(2), które wykorzystuje do precyzyjnego modelowania powierzchni energii potencjalnej w stanach wzbudzonych. Dzięki temu, dr Szabla jest w stanie interpretować złożone dane spektroskopowe oraz przewidywać wyniki eksperymentów, co znacząco przyczynia się do zrozumienia dynamiki fotochemicznej w badanych układach. Umiejętności i osiągnięcia habilitanta w tej dziedzinie potwierdzają jego pozycję jako lidera w badaniach nad fotostabilnością i fotorelaksacją cząsteczek organicznych.

Dr Szabla z powodzeniem łączy teoretyczne podejście z wynikami eksperymentalnymi, co znacząco podnosi wartość merytoryczną pracy i przyczynia się do rozwoju nauki na styku chemii, fizyki i biologii. Nie mam wątpliwości, że habilitant jest świetnym ekspertem w dziedzinie symulacji kwantowo-chemicznych, mogących znacznie ułatwić analizę i zrozumienie wyników eksperymentalnych uzyskanych metodami czasowo-rozdzielczej spektroskopii molekularnej. Po zapoznaniu się z osiągnięciami dr. Szabli mam jednak pewne wątpliwości co do „eksperymentalnego warsztatu” habilitanta. W szczególności nie jest dla mnie jasne w jakim stopniu uczestniczył On w wykonywaniu eksperymentów z użyciem technik REMPI, TAS czy TR-IR? Wątpliwości tych (być może nie do końca uzasadnionych) nie rozwiąła niestety nawet lektura autoreferatu habilitanta.

4. Podsumowanie

Dorobek naukowy dr. Rafała Szabli jest imponujący i bez wątpienia spełnia wysokie wymagania stawiane kandydatom ubiegającym się o stopień doktora habilitowanego. Wysoka jakość publikacji, ich znacząca liczba, szerokie uznanie w środowisku naukowym oraz sukcesy w realizacji projektów badawczych świadczą o wybitnych kompetencjach habilitanta i Jego znaczącym wkładzie w rozwój dyscypliny nauki chemicznej.



Podsumowując, stwierdzam z pełnym przekonaniem, że zbiór opublikowanych prac i dokumentów przedstawiony mi do recenzji spełnia podstawowe wymagania stawiane przez art. 219 ust. 1 pkt 2 i 3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. - Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r., poz. 478 z późn. zm.).

W konsekwencji z pełnym przekonaniem popieram wniosek o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego Panu dr. Rafałowi Szabli w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk chemicznych i wnioskuję o dopuszczenie Habilitanta do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.