



ZESPÓŁ STRUKTURY I DYNAMIKI MAKROUKŁADÓW

Wydział Chemii UWr
ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
tel. +48 71 375 72 24 | +48 71 375 72 46
www.uni.wroc.pl

Wrocław 28.08.2024 r.

dr hab. Aneta Jezierska, prof. UWr
Wydział Chemii
Uniwersytet Wrocławski
ul. F. Joliot-Curie 14
50-383 Wrocław
tel.: +48 71 3757224
e-mail: aneta.jezierska@uwr.edu.pl

Recenzja dorobku naukowego dr. inż. Rafała Szabli oraz Jego osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę przewodu habilitacyjnego zatytułowanego:
„Określenie roli promieniowania UV w prebiotycznej syntezie i selekcji komponentów RNA i DNA z wykorzystaniem metod chemii obliczeniowej” sporządzona na prośbę
Rady Dyscypliny Naukowej Nauki Chemiczne Politechniki Wrocławskiej

• Sylwetka naukowa Kandydata – informacje ogólne

Pan dr inż. Rafał Szabla tytuł inżyniera chemii uzyskał w 2011 r. na podstawie pracy dyplomowej zatytułowanej: „Theoretical studies of the mechanism of 2-aminooxazole formation in prebiotically plausible conditions”, której promotorem był dr inż. Robert W. Góra. Następnie, w roku 2012 uzyskał tytuł magistra biotechnologii na podstawie pracy magisterskiej zatytułowanej: „An ab initio study of photostability of molecules being hypothetical prebiotic precursors of ribonucleotides” wykonanej również pod kierunkiem Pana dr. inż. Roberta W. Góry na Wydziale Chemicznym Politechniki Wrocławskiej. W roku 2017 Habilitant uzyskał stopień doktora chemii biomolekularnej na podstawie rozprawy doktorskiej zatytułowanej: „Origin of life theory: theoretical studies of prebiotically plausible photochemical reactions”, której promotorem był Prof. RNDr. Jiří Šponer, DrSc. (Faculty of Science, Masaryk University, Brno, Czechy). W latach 2012-2019 Pan dr inż. Rafał Szabla zatrudniony był na stanowiskach badawczych w Institute of Biophysics of the Czech Academy of Sciences w Brnie w Czechach. Na uwagę zasługuje fakt, że w latach 2012-2017 Kandydat realizował również studia doktoranckie na Uniwersytecie Masaryka w Brnie. W latach 2019-2021 Pan dr inż. Rafał

Szabla zatrudniony był na stanowisku wykładowcy (Lecturer) obliczeniowej chemii organicznej w School of Chemistry University of Edinburgh. Natomiast zatrudnienie w jednostkach polskich wyglądało następująco:

- w latach 2017-2019 Pan dr inż. Rafał Szabla był zatrudniony na stanowisku adiunkta badawczego w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie (był to staż podoktorski finansowany przez Simons Foundation).
- od roku 2021 jest zatrudniony na Wydziale Chemicznym Politechniki Wrocławskiej na stanowisku adiunkta.

Zatem kariera naukowa Pana dr. inż. Rafała Szabli kształtowała się zarówno w krajowych, jak i zagranicznych jednostkach naukowych.

• Ocena działalności naukowej

Pan dr inż. Rafał Szabla jest współautorem 33 publikacji naukowych, a także jednego rozdziału w monografii naukowej (CHAPTER5: Rethinking UV-induced prebiotic selection of biomolecules. In Comprehensive Series in Photochemical and Photobiological Sciences, ed. Saija, F., Cassone, G.; Royal Society of Chemistry, Cambridge, Issue 20, p. 79-106, 2021), jak podaje w „Wykazie osiągnięć naukowych albo artystycznych”. Przed uzyskaniem stopnia doktora opublikował 12 prac, natomiast po uzyskaniu stopnia doktora w latach 2017-2024 – 21 publikacji naukowych. Sumaryczna wartość współczynnika oddziaływania (IF) dla wszystkich publikacji wynosi 245,0, natomiast 83,5 dla prac opublikowanych przed uzyskaniem stopnia doktora oraz 31,4 dla prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora, a niewchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej i 130,1 dla prac wchodzących w skład osiągnięcia naukowego. Prace cytowane były 673 razy (557 bez autocytowań). Indeks Hirscha wynosi H=15. Są to dane z dnia 09.04.2024 roku. Publikacje naukowe ukazały się w renomowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Jako przykłady wymienię: *Phys. Chem. Chem. Phys.*, *Photochem. Photobiol.*, *Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem. Lett.*, *Nat. Commun.*, *Nature*, *Chem. Commun.*, *Farad. Discuss.*, *Chem. Sci.*, *Chem. Eur. J.*, *Earth, Sci. Rep.* (informacje o pozostałych czasopismach, są zawarte w „Wykazie osiągnięć naukowych albo artystycznych” Habilitanta). Pan dr inż. Rafał Szabla jest również współautorem publikacji w *Wiadomościach Chemicznych*, 2023, 77, 11-12.

Dorobek naukowy Kandydata (po uzyskaniu stopnia doktora) kompletuje 14 wykładów na zaproszenie na konferencjach krajowych i zagranicznych, 3 wystąpienia konferencyjne oraz 17 seminariów instytucjonalnych i wydziałowych w jednostkach badawczych i stowarzyszeniach naukowych zarówno krajowych, jak i zagranicznych. Jak wynika z danych zawartych w „Wykazie osiągnięć naukowych albo artystycznych” (strona 12), Kandydat wygłaszał wykłady konferencyjne już jako student magistrant, a potem doktorant. Ponadto, po uzyskaniu stopnia doktora zaprezentował 4 postery na konferencjach międzynarodowych. Reasumując dorobek naukowy, jak i dane bibliometryczne oceniam pozytywnie.

Pan dr inż. Rafał Szabla odbył zarówno długo-, jak i krótkoterminowe staże podoktorskie realizowane zarówno w krajowych, jak i zagranicznych jednostkach naukowych. W tym miejscu należy wymienić Institute of Biophysics of the Czech Academy of Sciences, Brno, Czechy oraz Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie. Staże te były realizowane w latach 2017-2019. Następnie Kandydat uzyskał zatrudnienie w School of Chemistry, University of Edinburgh, UK – 20 miesięcy w latach 2019-2021. Pan dr inż. Rafał Szabla odbył również kilka krótkoterminowych staży naukowych, zarówno przed, jak i po uzyskaniu stopnia doktora. W roku 2013 Habilitant przez 1 miesiąc wizytował Technical University Munich (Prof. Wolfgang Domcke). Następnie w latach 2015-2018 odbył tygodniowe wizyty w Technical University Munich (Prof. Wolfgang Domcke), MRC Laboratory for Molecular Biology, Cambridge (Prof. J.D. Sutherland), University Pierre and Marie Curie, Paryż (Prof. A. M. Saitta), Institute for Complex Molecular Systems, Technical University Eindhoven (Prof. Rutger van Santen). W latach 2016-2022 Kandydat wizytował (tygodniowe pobyty) Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Harvard University, Cambridge, MA (Profesorem goszczącym był Prof. Dimitar Sasselov). W roku 2023 spędził tydzień w Center for Origin and Prevalence of Life, ETH Zurich, gdzie profesorem goszczącym był Prof. Markus Reiher. Jak wskazuje dr inż. Rafał Szabla na stronie 15 „Wykazu osiągnięć naukowych albo artystycznych”, wizyty te pozwoliły mu na nawiązanie samodzielnych współprac. Warto zauważyć, że niektóre z tych współprac zaowocowały wspólnymi artykułami naukowymi.

Pan dr inż. Rafał Szabla brał udział w realizacji 3 projektów jako wykonawca, które były zatytułowane: „Theoretical and experimental studies related to the prebiotic chemistry of



Wydział Chemii UW
ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
tel. +48 71 375 72 24 | +48 71 375 72 46
www.uni.wroc.pl

nucleic acids”, „Theoretical and experimental studies on the origin of life” oraz „Center for RNA Biology” (Czech Science Foundation (GACR)). W czterech projektach był/jest kierownikiem: „Mechanistic studies of prebiotically plausible UV-induced chemistry” (Projekt Simons Collaboration on the Origins of Life Postdoctoral Fellowships, Simons Foundation (U.S.A.)), „Badania chemii cząsteczek będących prebiotycznymi nośnikami energii” (projekt SONATA 18, Narodowe Centrum Nauki (NCN)), „Badania samoreplikacji RNA z wykorzystaniem chemii kwantowej i uczenia maszynowego” (projekt SONATA BIS 12, Narodowe Centrum Nauki (NCN)), a także „Fotouszkodzenia i autonaprawa pierwotnych form RNA i DNA” (projekt OPUS 19, Narodowe Centrum Nauki (NCN)). Zaangażowanie w projekty badawcze w roli wykonawcy, jak również kierownika pokazuje aktywność i skuteczność Habilitanta w pozyskiwaniu środków na prowadzenie badań.

Od 2017 roku do kwietnia 2024 roku Pan dr inż. Rafał Szabla recenzował 35 artykułów w czasopismach o zasięgu międzynarodowym takich jak: *Journal of the American Chemical Society*, *Nature Communications*, *Chemical Communications*, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, *The Journal of Physical Chemistry A*, *Plos ONE*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, *ACS Central Science*, *ACS Earth and Space Chemistry*, *Journal of Molecular Modeling*, *Molecules*, *Current Organic Chemistry*, *Acta Physica Polonica*, *ChemSystemsChem*, *ChemPhysChem*, *iScience*, *New Journal of Chemistry*, *Journal of Molecular Evolution*. W roku 2021 Pan dr inż. Rafał Szabla był recenzentem rozprawy doktorskiej i zewnętrznym egzaminatorem podczas obrony pracy doktorskiej, której promotorem był Prof. Jeremy Harvey. Habilitant był również członkiem zespołu oceniającego wnioski o finansowanie projektów oraz stanowisk dla doktorantów (PhD studentships) na School of Chemistry, University of Edinburgh. Ponadto recenzował wnioski naukowe dla 4 instytucji finansujących badania: *Swedish Research Council*, *Leverhulme Centre for Life in the Universe*, *Agence Nationale de la Recherche (ANR)*, *Leverhulme Trust*.

Działalność naukowa Habilitanta była również nagradzana i wyróżniana, o czym świadczą np.: Nagroda Instytutu Biofizyki Czeskiej Akademii Nauk w Brnie dla Młodych Naukowców otrzymana w roku 2017, Stypendium START Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej z 2019 roku, Nagroda Finałowa w dziedzinie nauk ścisłych w konkursie Nagrody Naukowe

„Polityki” w 2021 roku, czy też Stypendium Ministra Edukacji i Nauki dla Młodych Wybitnych Naukowców otrzymane w 2023 roku.

Od stycznia 2023 roku jest również członkiem doradczej rady edytorskiej (Editorial Advisory Board) w czasopiśmie ChemSystemsChem wydawanym przez Wiley-VCH GmbH, Weinheim.

Jak wynika z informacji zawartych w „Autoreferacie” i „Wykazie osiągnięć naukowych albo artystycznych”, Kandydat wykazał się istotną działalnością naukową, którą realizował w więcej niż jednej uczelni i instytucji naukowej, zarówno w kraju, jak i za granicą. Dane scjentometryczne Pana dr. inż. Rafała Szabli, szczególnie po uzyskaniu stopnia doktora, jak również Jego aktywność badawczą i publikacyjną, można uznać za bardzo dobre.

• **Ocena merytoryczna osiągnięcia naukowego**

Podstawą o ubieganie się o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego jest osiągnięcie naukowe zatytułowane: „Określenie roli promieniowania UV w prebiotycznej syntezie i selekcji komponentów RNA i DNA z wykorzystaniem metod chemii obliczeniowej” przedstawione przez Pana dr. inż. Rafała Szablę. Jest to cykl 15 spójnych tematycznie publikacji opublikowanych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym, takich jak: Chemical Physics Physical Chemistry (4 prace), Photochemistry and Photobiology (1 praca), Chemical Physics (1 praca), Journal of Physical Chemistry Letters (1 praca), Nature Communications (2 prace), Nature (1 praca), Chemical Communications (2 prace), Faraday Discussions (1 praca) i Chemical Science (2 prace). Publikacje te ukazały się w latach 2017-2024. Sumaryczny IF tych prac wynosi 130,1, czyli średnia wartość IF na jedną publikację jest równa 8,67. Liczba cytowań bez autocytowań wynosi 206 (dane z kwietnia 2024 r.). Niestety, wśród publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego nie ma publikacji, gdzie Kandydat byłby jedynym autorem. Wszystkie publikacje są wieloautorskie. W pięciu pracach jest 4 współautorów (H3, H4, H5, H10, H11), 5 współautorów jest w pracach H12 i H13, 6 współautorów w publikacjach H1, H2 i H9, natomiast 8 współautorów jest w publikacjach H7, H14, H15, 9 współautorów jest w pracy H8 i 10 współautorów w pracy H6. Pan dr inż. Rafał Szabla jest pierwszym autorem w 3 publikacjach, na drugim miejscu występuje w 5 publikacjach i podobnie jest z ostatnim miejscem w spisie współautorów. Pan dr inż. Rafał Szabla jest autorem korespondencyjnym w 13 publikacjach, choć nie jest jedynym



autorem do korespondencji, ponieważ współdzieli tę funkcję w 10 publikacjach. W publikacjach H3, H11 i H13 jest jedynym autorem do korespondencji. Wieloautorstwo tych publikacji podyktowane było współpracami na gruncie krajowym, jak i międzynarodowym. W zestawieniu znaleźć można prace eksperymentalno-teoretyczne oraz wykonane w oparciu o narzędzia chemii obliczeniowej. Interdyscyplinarność badań wskazuje również na fakt umiejętności pracy zespołowej wykazywanej przez Pana dr. inż. Rafała Szablę. W dokumentacji przewodu habilitacyjnego znalazły się oświadczenia wybranych współautorów publikacji, które wchodzi w skład osiągnięcia naukowego. Habilitant nie zamieścił oświadczeń wszystkich współautorów, jednak w przypadku niektórych prac znajduje się na końcu publikacji „author contribution“ i na tej podstawie możliwe było oszacowanie wkładu w publikację niektórych współautorów. W pracach H1, H6, H8 znajduje się informacja, którzy współautorzy wnieśli równy wkład w te publikacje. Prace H4, H6, H9 i H10 stanowią podstawę rozprawy doktorskiej, w której Habilitant był promotorem pomocniczym.

Opis osiągnięcia naukowego (5) jest kompetentny i stanowi spójną całość, chociaż Habilitant nie ustrzegł się błędów językowych. Opis osiągnięcia został opatrzony krótkim wstępem, po którym następują 2 rozdziały, w których Pan dr inż. Rafał Szabla przybliży czytelnikowi ideę czasowo-rozdzielczych eksperymentów spektroskopowych dla chromoforów bioorganicznych oraz narzędzia chemii teoretycznej stosowane do symulacji mechanizmów fotorelaksacji fragmentów biomolekularnych. Następnie Habilitant w pięciu rozdziałach przedstawia główne wątki swoich badań, a ostatni rozdział stanowią wnioski wynikające z tych badań. „Autoreferat” kończy rozdział zawierający Bibliografię, na którą składa się 141 pozycji literaturowych. Głównym celem wykonanych badań, było zrozumienie roli promieniowania UV w tworzeniu się biomolekuł oraz prawdopodobnej prebiotycznej syntezie fragmentów RNA/DNA na młodej Ziemi. Można zatem uznać, że Habilitant wyznaczył sobie pośrednie cele badawcze, które kolejno omówił w opisie osiągnięcia naukowego, a które posłużyły do realizacji celu nadrzędnego. W publikacjach H1 i H2 Pan dr inż. Rafał Szabla i współpracownicy badali fotodynamikę alternatywnych zasad kwasów nukleinowych RNA/DNA w fazie gazowej, czyli fotodynamikę izolowanej izoguaniny i 2,6-diaminopuryny. Są to prace eksperymentalno-teoretyczne. W przypadku izoguaniny, Autorzy wykazali istnienie dwóch tautomerów enol-N7 i keto-N3,7. Jednakże wykonane pomiary typu sonda-pompa

pozwoliły uzyskać sygnał tylko dla tautomeru keto-N3,7. Rezultaty dalszych symulacji kwantowo-chemicznych wykonane dla dwóch tautomerów keto i dwóch enol wskazały na istotne różnice w mechanizmach fotorelaksacji pomiędzy tymi typami form tautomerycznych. W przypadku 2,6-diaminopuryny, eksperymenty w fazie gazowej pozwoliły zidentyfikować jej dwa główne tautomery – 7H i 9H. Symulacje kwantowo-chemiczne powierzchni energii potencjalnej w stanach wzbudzonych posłużyły do określenia mechanizmów molekularnych fotorelaksacji. W przypadku tautomeru 7H, Autorzy zaproponowali dwa bezpromieniste mechanizmy fotorelaksacji, gdzie przewidywanym głównym procesem jest fałdowanie pięcioczołowego fragmentu pierścienia purynowego. W przypadku tautomeru 9H dr inż. Rafał Szabla i współautorzy ustalili, że tautomer ten może podlegać całkowicie bezbarierowemu mechanizmowi fotodezaktywacji, który obejmuje silne wychylenie grupy aminowej w pozycji 6 poza płaszczyznę pierścienia, bądź też osiągnąć minimum $S_1(\pi\pi^*)$ z pofałdowanym pierścieniem aromatycznym przy atomie węgla C2. Następnym problemem badawczym, omawianym przez Habilitanta w „Autoreferacie” jest wpływ otoczenia na fotochemię elementów, z których zbudowane są kwasy nukleinowe (publikacje H3-H6). Pan dr inż. Rafał Szabla i współpracownicy wykazali, że różnice w dynamice stanu wzbudzonego dla fragmentów budulcowych kwasów nukleinowych *in vacuo* i w środowisku wodnym wynikają z bezpośredniego udziału cząsteczek rozpuszczalnika w fotochemii. Analizowali fotoindukowane przeniesienie elektronu z cząsteczki wody do cząsteczki chromoforu. Symulacje kwantowo-chemiczne zostały wykonane dla modeli mikrosolwatacyjnych z różną ilością cząsteczek wody, czy też metanolu (praca H5), a zatem w swoich badaniach Autorzy stosowali zarówno ciągłe, jak i dyskretne modele rozpuszczalnikowe. Związki, które poddali badaniom to metylocytozyna, 2'-deoksyrybocytydyna, 2-tiocytozyna, guanina, guanozyna i rybonukleozyd tiocytozyny. Kolejnym zagadnieniem badanym przez Kandydata były prebiotyczne syntezy nukleozydów wspomagane promieniowaniem UV (H7-H8). W publikacji H7 zostały przedstawione wyniki badań dla arabinonukleotydu cytozyny, uracylu, adeniny i guaniny. Natomiast w publikacji H8, Autorzy przedstawili mechanizmy prebiotycznej syntezy nukleozydów pirymidynowych RNA i nukleozydów purynowych DNA. Jak podkreśla Habilitant, w tej publikacji przedstawiony został pierwszy przykład fotoredukcji wspomaganej oddziaływaniem chalcogenowym. W pracach H9-H11 dr inż. Rafał Szabla wraz ze



Wydział Chemii UWr
ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
tel. +48 71 375 72 24 | +48 71 375 72 46
www.uni.wroc.pl

współpracownikami badał fotostabilność ważnych prebiotycznych prekursorów dla nukleozydów i nukleotydów kwasu nukleinowego RNA. Otrzymane rezultaty badań dla aminooksazoliny rybozy lub arabinozy (RAO lub AAO), a także tionu oksazolidynonu (AOT) pozwoliły Autorom na konkluzję, że oksazolinowe produkty są wystarczająco fotostabilne, aby przetrwać w warunkach z silnym promieniowaniem UV. Kolejnym badanym związkami były 2-aminoimidazol (H10). Na podstawie symulacji metodami dynamiki nieadiabaticznej z przeskokami pomiędzy powierzchniami w połączeniu z metodą ADC(2)/aug-cc-pVDZ, Autorzy zauważyli, że klastry 2-aminoimidazolu-(H₂O)_n podlegają wyłącznie fotostabilizującemu mechanizmowi przeniesienia protonów napędzanemu elektronami po fotowzbudzeniu przy 267 nm. Rezultaty badań otrzymanych na drodze symulacji kwantowo-chemicznych zostały potwierdzone badaniami eksperymentalnymi z naświetlaniem w zakresie UV. Autorzy publikacji zauważyli również, że 2-aminoimidazol może działać jako filtr przeciwsłoneczny dla innych prebiotycznych cząsteczek organicznych, czego przykładem może być 2-aminooksazol. Kolejnym badanym związkiem był 2-tiooksazol (H11). Jest to praca, która łączy symulacje kwantowo-chemiczne z badaniami eksperymentalnymi. Na podstawie symulacji kwantowo-chemicznych Autorzy zauważyli, że następuje zrywanie wiązania C–O, co skutkuje fotodegradacją aromatycznego pierścienia oksazolowego. Natomiast wyniki pomiarów eksperymentalnych naświetlania promieniowaniem UV, przeprowadzone w środowisku wodnym wykazały, że naświetlanie przy 254 nm i 300 nm powoduje całkowitą fotodegradację 2-tiooksazolu. A zatem, Pan dr inż. Rafał Szabla i współpracownicy wykazali, że początkowe etapy prebiotycznej syntezy pirymidynowych i 8-okso-purynowych nukleotydów kwasu nukleinowego RNA wymagałyby ochrony przed światłem w zakresie UV, bądź też należałoby uwzględnić cząsteczki mogące chronić je przed działaniem słońca. Ostatnim zagadnieniem dyskutowanym przez Pana dr inż. Rafała Szablę jest fotochemia i samonaprawa oligomerów kwasu nukleinowego DNA (publikacje H12-H15). W publikacji H12 Autorzy badali pary zasad Guanina-Cytozyna i Hipoksantyna-Cytozyna. Wykazali, że zamienną wersję mechanizmu przeniesienia protonu napędzanego elektronami (EDPT) można również zainicjować w ciemnych stanach elektronowych pirymidynowych zasad azotowych. W publikacji H13 Autorzy dyskutują mechanizmy samonaprawy uszkodzonego tetranukleotydu GAT=T w oparciu o narzędzia chemii obliczeniowej. Rezultaty

badań otrzymanych z symulacji metodą klasycznej dynamiki molekularnej pozwoliły na wyodrębnienie dwóch konformerów, które Autorzy nazwali GA-*syn* i GA-*anti*. Symulacje w elektronowym stanie wzbudzonym pozwoliły Panu dr. inż. Rafałowi Szabli i współpracownikom na zaproponowanie mechanizmu, który nazwali sekwencyjnym przeniesieniem elektronu (SET). Jak Autorzy zauważyli, może on wystąpić w przypadku GA-*syn* i GA-*anti* z niewielkimi różnicami. W publikacji H14 Pan dr inż. Rafał Szabla i współpracownicy prezentują rezultaty badań otrzymane w oparciu o narzędzia chemii teoretycznej oraz eksperymentalne fotochemii uszkodzonych trinukleotydów DT=T i T=TD, porównując je z ich odpowiednikami AT=T i T=TA. Ideą tej publikacji było przeanalizowanie możliwości samonaprawczych kwasu nukleinowego DNA indukowanych 2,6-diaminopuryną (D). Autorzy wykazali, że zastąpienie adeniny 2,6-diaminopuryną umożliwia naprawę dimerów cyklobutanowo-pirymidynowych (CPD) w 92%. W artykule przedstawili również prawdopodobną prebiotyczną syntezę dezoksyrybonukleozydu 2,6-diaminopuryny oraz badanie porównawcze fotostabilności nukleozydów adeniny i 2,6-diaminopuryny. Rezultaty badań wskazały na około dwukrotnie szybszą degradację 2,6-diaminopuryny pod wpływem napromieniowania przy 254 nm. Ostatnim elementem osiągnięcia naukowego, zaprezentowanym przez Habilitanta, jest badanie wpływu oddziaływań warstwowych na fotoindukowane przeniesienie elektronów w kwasie nukleinowym DNA (H15). Pan dr inż. Rafał Szabla i współpracownicy podjęli próbę wyjaśnienia różnic w wydajności fotoindukowanej samonaprawy 5'-GAT=T-3' i 5'-T=TAG-3', o odwrotnym kierunku ułożenia zasad. Autorzy wskazują, że wydajność samonaprawy GAT=T i T=TAG wynosi odpowiednio około 33% i 40%. Rezultaty badań otrzymanych metodą klasycznej dynamiki molekularnej pokazały, że dominujące konformery T=TAG wykazują znacznie lepsze nakładanie się zasad azotowych guaniny i adeniny w oddziaływaniach stackingowych, niż w GAT=T. W oparciu o symulacje metodą ADC(2)/MM, Autorzy wykazali, że wyższy stopień nakładania się stosów między zasadami G i A obniża wertykalną energię wzbudzenia w T=TAG. Dodatkowo, lepsze nakładanie się zasad G i A spowalnia inne mechanizmy fotorelaksacji, które mogłyby być konkurencyjne dla mechanizmu SET.

Pan dr inż. Rafał Szabla przedstawił wyniki badań pokazując zrozumienie tematu oraz zaangażowanie w pracę naukową. Wyniki badań zarówno teoretycznych, jak

i eksperymentalnych dostarczyły wielu cennych informacji o procesach, które mogły przyczynić się do zrozumienia i odtworzenia chemii wczesnej Ziemi. Przedstawione wyniki badań mają element nowości naukowej i wnoszą istotny wkład w dziedzinę badań reprezentowaną przez Habilitanta. Do najważniejszych osiągnięć Kandydata można zaliczyć m.in.:

- wykazanie niższej fotostabilności dwóch analogów zasad azotowych (czyli izoguaniny i 2,6-diaminopuryny), która jest przyczyną ich szybkiej fotodegradacji;
- wykazanie, że nukleozydy w środowisku wodnym są podatne na reakcje fotohydratacji, fotoutleniania i fotoanomeryzacji;
- wykazanie, że selekcja prebiotyczna biomolekularnych fragmentów budulcowych była podyktowana szybkością istotnych reakcji fotochemicznych prowadzących do utworzenia nukleozydów kwasów nukleinowych RNA i DNA, a także fotostabilnością chromoforowych produktów pośrednich reakcji;
- zidentyfikowanie najbardziej fotostabilnych prebiotycznych prekursorów kwasu nukleinowego RNA;
- wykazanie, że oligomery kwasu nukleinowego DNA zawierające fotoniestabilne zasady pirymidynowe, a także umiarkowanie foto(nie)stabilną zasadę purynową (2,6-diaminopurynę), wykazują niezwykłą fotostabilność;
- wykazanie, że określone sekwencje oligomerów kwasów nukleinowych DNA i RNA mogą być chronione poprzez fotoindukowane mechanizmy samonaprawy.

W podsumowaniu tej części recenzji, stwierdzam, że przedstawione do oceny osiągnięcie naukowe jako cykl powiązanych tematycznie publikacji oraz uzyskane wyniki stanowią znaczny wkład w rozwój dyscypliny nauki chemiczne, chociaż swoją ocenę opieram na 11 pracach. Jak wskazuje Habilitant w „Autoreferacie”, prezentowane osiągnięcie naukowe jest istotnym rozwinięciem tematyki badawczej, którą realizował w czasie studiów doktoranckich. Kandydat wskazuje nowe wątki tematyczne, które nie były uwzględnione w tematyce związanej z doktoratem, a do których należą:

- samonaprawa kwasu nukleinowego DNA oraz fotofizyka oligonukleotydów;

- interpretacja widm kilku rodzajów ultraszybkiej spektroskopii czasowo-rozdzielczej. Warto podkreślić, że Habilitant wypracował warsztat badawczy, na który składają się różne metody nowoczesnej chemii obliczeniowej.

• **Ocena dorobku dydaktycznego i organizacyjnego**

Pan dr inż. Rafał Szabla swoje doświadczenie dydaktyczne zdobywał zarówno w kraju, jak i za granicą. Kandydat podaje, że prowadził 9 kursów dla studentów, w skład których wchodzi: *Introduction to Academic Writing and Publishing, Reactive Intermediates, Physical Organic Chemistry & Organometallic Chemistry & Carbonyl Chemistry, Organic Chemistry Laboratory, Data Driven Chemistry, Organic Photochemistry and Photocatalysis, Grupowy projekt badawczy w chemii obliczeniowej, Modele Matematyczne i Metody Symulacji w Chemii Teoretycznej i Fizyka II*. Szczegółowe informacje znajdują się w „Autoreferacie” Habilitanta.

Pan dr inż. Rafał Szabla był promotorem 5 prac dyplomowych – magisterskich i licencjackich. W latach 2020-2021 był również głównym promotorem doktorantki na School of Chemistry, University of Edinburgh. W latach 2018-2022 był promotorem pomocniczym w przewodzie doktorskim na Politechnice Wrocławskiej. Od października 2023 jest promotorem pomocniczym dwojga Doktorantów.

W 2021 r. Pan dr inż. Rafał Szabla był jednym z głównych organizatorów międzynarodowej konferencji astrobiologicznej Life and Space 2021, organizowanej przez Polskie Towarzystwo Astrobiologiczne.

Ponadto jest członkiem towarzystw naukowych, takich jak: Polskie Towarzystwo Astrobiologiczne, UK Centre for Astrobiology, Simons Collaboration on the Origins of Life, a także Komisji Chemii Teoretycznej i Obliczeniowej PAN we Wrocławiu.

Pan dr inż. Rafał Szabla również angażuje się w popularyzację nauki. W „Autoreferacie” legitymuje się 10 aktywnościami w latach 2019-2023, do których zalicza: *wywiady podsumowujące osiągnięcia naukowe dla portalu Nauka w Polsce, kanału 4-tego Polskiego Radia, TV Polsat i TVP3, rolę panelisty w popularno-naukowym panelu Exoplanet Futures organizowanym przez Massachusetts Institute of Technology, zostanie gościem audycji Eureka w Programie 1 Polskiego Radia oraz audycji Off-Czarek w Radio TOKFM, wpis na blogu Nature Chemistry Community zatytułowany „From a glass of beer to modified DNA”,*

uczestnictwo w dwóch panelach dyskusyjnych organizowanych przez Polskie Towarzystwo Astrobiologiczne, wykład popularno-naukowy dla Centrum Kopernika Badań Interdyscyplinarnych UJ, wykład popularno-naukowy na 75-lecie II LO im. Andrzeja Frycza-Modrzewskiego w Rybniku, rolę panelisty w panelu dyskusyjnym otwierającym Copernicus Festival, a także napisanie jednego artykułu popularno-naukowego dla „Tygodnika Powszechnego”.

Przedstawiony powyżej dorobek dydaktyczny i organizacyjny Pana dr. inż. Rafała Szabli wskazuje jednoznacznie, że posiada on wkład w kształcenie młodej kadry naukowej, a także jest zaangażowany w pracę organizacyjną.

• **Wniosek końcowy**

W podsumowaniu recenzji stwierdzam, że przedłożona do oceny rozprawa habilitacyjna zatytułowana: „Określenie roli promieniowania UV w prebiotycznej syntezie i selekcji komponentów RNA i DNA z wykorzystaniem metod chemii obliczeniowej” oraz całokształt dorobku naukowego Pana dr. inż. Rafała Szabli spełnia wymagania stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego określone w art. 219 ust. 1 pkt 1-3 p.s.w.n Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce.

W związku z powyższym popieram wniosek Pana dr. inż. Rafała Szabli o nadanie Mu stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne i wnioskuję o dopuszczenie Habilitanta do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Aneta Jezierska

dr hab. Aneta Jezierska, prof. UWr