



KATEDRA  
BIOFIZYKI

Lublin, 2 czerwca 2025 r.

Prof. dr hab. Wiesław I. Gruszecki  
Katedra Biofizyki, Instytut Fizyki  
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej  
w Lublinie

**Ocena rozprawy doktorskiej mgr. Jakuba Hryca pt. „Badanie mechanizmu formowania się kanałów wodnych w układach galaktolipidów modelujących błony tylakoidów oraz charakterystyka ich interfezy”**

Życie na powierzchni Ziemi zasilane jest światłem słonecznym a fotosynteza jest procesem umożliwiającym konwersję energii promieniowania elektromagnetycznego na energię wiązań chemicznych, która może być bezpośrednio wykorzystana do napędzania reakcji biochemicznych żywych organizmów. Co więcej, produktem ubocznym fotosyntezy tlenowej jest tlen molekularny pochodzący z rozszczepienia cząsteczek wody, zasilający naszą atmosferę i wykorzystywany do oddychania. Czyniło to w przeszłości i czyni nadal proces fotosyntezy ważnym obiektem badań naukowych o charakterze czysto poznawczym jak i aplikacyjnym, ukierunkowanym na zwiększenie ilości plonów w produkcji roślinnej. Wśród problemów naukowych związanych z poznaniem związku struktury i funkcji aparatu fotosyntetycznego pojawiają się również te związane bezpośrednio z właściwościami fazy lipidowej błon tylakoidów. W ten nurt badawczy wpisuje się bezpośrednio

tematyka reprezentowana w pracy doktorskiej pana mgr. Jakuba Hryca, co czyni ją w mojej opinii nie tylko interesującą, ale również ważną.

Praca doktorska zrealizowana została pod kierunkiem prof. Marty Pasenkiewicz-Gieruli w Zakładzie Biofizyki Obliczeniowej i Bioinformatyki na Wydziale Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Rozprawa doktorska zredagowana została w języku polskim, na 82. stronach standardowego maszynopisu, w oparciu o typowy, klarowny i logiczny układ. Po obszernych streszczeniach, opracowanych w językach polskim i angielskim, Autor zamieszcza Wstęp, numerowany jako rozdział 5., w ramach którego znalazły się treści przybliżające czytelnikowi tematykę związaną z budową i składem lipidowym błon tylakoidów. Szczególna uwaga poświęcona została we wstępie interfacie błona-woda, co wydaje się zabiegiem zrozumiałym i w pełni uzasadnionym, uwzględniając znaczenie tego granicznego obszaru błony tylakoidu w wielu mechanizmach fizykochemicznych o znaczeniu fizjologicznym. Ostatni podrozdział rozdziału wstępnego zatytułowany „Cele pracy” jest miejscem, w którym sformułowane zostały zarówno te bardziej strategiczne jak i cząstkowe cele projektu doktorskiego, wśród nich analiza możliwości formowania się kanałów wodnych w układach galaktolipidowych. Rozdział 6. pt. „Metody” zawiera z jednej strony propedeutyczny opis metody symulacji dynamiki molekularnej, z drugiej zaś strony jest miejscem prezentacji szczegółów technicznych prowadzonych badań obliczeniowych, na poziomie precyzji umożliwiającym odtworzenie przeprowadzonych symulacji przez przygotowanych specjalistów. Obydwa aspekty tego rozdziału metodycznego oceniam bardzo wysoko. Badania przeprowadzone w ramach pracy doktorskiej przedstawione zostały w ramach rozdziału 7. pt. „Wyniki”. Rozdział ten zredagowany został w oparciu o podstrukturę odzwierciedlającą poszczególne etapy projektu doktorskiego, wśród nich symulacje dynamiki molekularnej układów lamelarnych MGDG i DGDG, badania interfazy woda-błona w tych układach oraz interesujące z fizjologicznego punktu widzenia badania możliwości formowania fazy heksagonalnej typu H<sub>II</sub>. Zaprezentowane wyniki poddane zostały wieloaspektowej dyskusji w ramach rozdziału

8. pt. „Dyskusja”, zaś najważniejsze uzyskane rezultaty zestawione w ramach krótkiego rozdziału 9. pt. „Podsumowanie”. Rozprawę zamyka zestawienie cytowanego piśmiennictwa, w ramach rozdziału 10. pt. „Bibliografia”. W mojej opinii, rozprawa doktorska pana mgr. Jakuba Hryca jest opracowaniem zredagowanym z dbałością o precyzję języka oraz w oparciu o przemyślaną i wysokiej jakości warstwę ilustracyjną. Największą jednak wartością rozprawy jest oryginalność zaprojektowanych prac obliczeniowych oraz waga uzyskanych rezultatów. Wśród nich chciałbym wyróżnić następujące:

1. Stworzenie precyzyjnego modelu dwuwarstwy lipidowej uformowanej z mieszaniny lipidów chloroplastowych MGDG:DGDG, w oparciu o walidację uwzględniającą parametry uzyskane w badaniach eksperymentalnych (wśród nich średnie pole powierzchni na cząsteczkę lipidu, szerokość błony i rozkłady kątów torsyjnych wiązań glikozydowych).
2. Dokonanie precyzyjnej analizy formowania wiązań wodorowych w badanych układach, pomiędzy cząsteczkami lipidów oraz lipidów i warstwy wody.
3. Określenie determinantów strukturalnych sprzyjających formowaniu się kanałów wodnych w warstwach lipidowych.
4. Analiza możliwości transformacji struktur lamelarnych formowanych przez lipidy chloroplastowe w struktury nielamelarne, istotne z perspektywy właściwości strukturalnych, ale również funkcjonalnych błon tylakoidowych.

Praca doktorska pana mgr. Jakuba Hryca, jako opracowanie wysoce nowatorskie, rodzi również pewne pytania natury poznawczej. Niektóre z nich formułuję poniżej.

1. Zrąb lipidowy naturalnych błon tylakoidów oprócz MGDG oraz DGDG zawiera jeszcze SQDG oraz PG, frakcje o niewielkiej zawartości, ale szczególnych właściwościach. Ciekaw jestem, czy zdaniem Doktoranta możliwe jest odtworzenie specyficznych właściwości strukturalnych oraz dynamicznych błon chloroplastowych jedynie w oparciu o dwa ich główne składniki?
2. Wyniki badań grupy prof. Kazimierza Strzałki pokazały istotne znaczenie istnienia fazy nielamelarnej typu H<sub>II</sub> w funkcjonowaniu cyklu ksantofilowego w błonach tylakoidów. Ciekaw jestem, czy formowanie kanałów wodnych w tego typu układach błonowych, pokazane w pracy doktorskiej, mogłoby mieć znaczenie w wiązaniu enzymów cyklu ksantofilowego z błonami oraz w funkcjonowaniu reakcji epoksydacji zeaksantyny i deepoksydacji wiolaksantyny w błonach?

### *Konkluzja*

Formułując konkluzję chciałbym stwierdzić, iż pan mgr Jakub Hryc przedstawił wartościową rozprawę doktorską, opierającą się na wynikach precyzyjnie zaprojektowanych oraz przeprowadzonych w oparciu o wieloaspektową analizę prac obliczeniowych w zakresie symulacji dynamiki molekularnej układów o znaczeniu biologicznym. Obszerna część wyników uzyskanych w ramach realizacji projektu doktorskiego upowszechniona została międzynarodowemu środowisku specjalistów w ramach dwóch artykułów naukowych: opublikowanych w 2022 r. w czasopiśmie

*Frontiers in Molecular Biosciences* oraz w 2023 r. w czasopiśmie *IScience*. Moim zdaniem, zaprezentowany w rozprawie poziom erudycji Doktoranta oraz wysoka jakość naukowa uzyskanych wyników stanowią rekomendację mgra Jakuba Hryca jako doskonale przygotowanego oraz otwartego na wyzwania poznawcze badacza. Przedstawiona rozprawa doktorska zawiera rozwiązania ważnych oraz aktualnych problemów naukowych, wnosi do nauki światowej istotny postęp, spełniając tym samym wymagania stawiane w postępowaniach doktorskich, czyniąc zadość warunkom określonym w Ustawie „Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce” z dnia 20 lipca 2018 r. W związku z powyższym, wnoszę o dopuszczenie pana mgr. Jakuba Hryca do kolejnych etapów postępowania o nadanie stopnia naukowego doktora, w szczególności do publicznej obrony.



Signed by / Podpisano  
przez:

Wiesław Ignacy  
Gruszecki  
Uniwersytet Marii Curie-  
Szkłodowskiej

Date / Data: 2025-06-02  
16:22