

Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny

I. INFORMACJA O OSIĄGNIĘCIACH NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY

Moje osiągnięcie naukowe zatytułowane „Opracowanie narzędzi obliczeniowych opartych o metody uczenia maszynowego i ich wykorzystanie w komputerowo wspomaganym projektowaniu leków” stanowi cykl 11 powiązanych tematycznie publikacji naukowych (10 prac oryginalnych, 1 praca przeglądowa) o sumarycznym współczynniku wpływu IF = 53,248.

H1. Podlewska, S.; Czarnecki, W.; Kafel, R.; Bojarski, A. J. Creating the New from the Old: Combinatorial Libraries Generation with Machine-Learning-Based Compound Structure Optimization. *J. Chem. Inf. Model.* **2017, *57*, 133–147, IF₂₀₁₇ = 3,804, liczba punktów MEiN = 40.**

Mój wkład w publikację polegał na realizacji następujących zadań: zaprojektowanie metodologii do generowania nowych związków w oparciu o fragmenty strukturalne optymalne dla aktywności związków, przygotowanie zestawów danych z bazy ChEMBL dla 8 celów biologicznych, reprezentacja danych w postaci fingerprintów podstrukturalnych, identyfikacja fragmentów strukturalnych występujących w ligandach – elementów wejściowych do generowania nowych związków, opracowanie metodologii łączenia optymalnych fragmentów w nowe potencjalne ligandy danego receptora, weryfikacja skuteczności opracowanego podejścia do generowania nowych związków, analiza wygenerowanych bibliotek związków (przygotowanie rozkładów wybranych własności, analiza podobieństwa do istniejących ligandów), interpretacja uzyskanych wyników, przygotowanie tekstu manuskryptu oraz figur (za wyjątkiem jednej, figury nr 3, której autorem jest Wojciech Czarnecki).

H2. Podlewska, S.; Kafel, R.; Lacivita, E.; Satała, G.; Kooistra, A. J.; Vass, M.; de Graaf, C.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J.; Mordalski, S. Structural insights into serotonin receptor ligands polypharmacology. *Eur. J. Med. Chem.*, **2018, *151*, 797–814, IF₂₀₁₈ = 4,833, liczba punktów MEiN = 40.**

Mój wkład w publikację był związany z opracowaniem koncepcji badań oraz przeprowadzeniem eksperymentów modelowania molekularnego, tj. nałożeniem i porównaniem sekwencji aminokwasowych rozpatrywanych receptorów serotoninowych wraz z identyfikacją pozycji mogących odpowiadać za selektywność, przygotowaniem zestawów związków selektywnych i nieselektywnych na podstawie danych z bazy ChEMBL, przeprowadzeniem procedury modelowania homologicznego receptorów 5-HT_{1A}, 5-HT_{2A}, 5-HT₆ oraz 5-HT₇, przeprowadzeniem dokowania odpowiednich zestawów związków wraz

ze statystyczną analizą częstości występowania poszczególnych oddziaływań w rozpatrywanych grupach ligandów, przeprowadzeniem procedury wirtualnego przesiewania bazy ZINC pod kątem poszukiwania nowych selektywnych ligandów, wyborem związków do zakupu oraz analizą wyników badań powinowactwa *in vitro* do rozpatrywanych receptorów. Ponadto, przeprowadziłam konfrontację wyników eksperymentalnej weryfikacji powinowactwa zakupionych związków z rezultatami modelowania molekularnego oraz przygotowałam wstępną wersję manuskryptu wraz z figurami.

H3. Vass, M.[‡]; Podlewska, S.[‡]; de Esch, I. J. P.; Bojarski, A. J.; Leurs, R.; Kooistra, A. J.; de Graaf, C. Aminergic GPCR–Ligand Interactions: A Chemical and Structural Map of Receptor Mutation Data. *J. Med. Chem.*, **2019**, *62*, 3784–3839, IF₂₀₁₉ = 6,205, liczba punktów MEiN = 200

Moją rolą w przedstawionej pracy było dokonanie przeglądu literaturowego w zakresie danych mutagenetycznych dla receptorów serotoninowych, dopaminowych, muskarynowych oraz alfa-adrenergicznych oraz wykonanie analizy statystycznej uzyskanych danych. Ponadto, opracowałam protokół obliczeniowy do przewidywania efektu mutagenetycznego dla danej pary: mutacja w określonej pozycji-ligand, który zastosowałam do analizy informacji mutagenetycznej dla wszystkich receptorów aminergiczych rozpatrywanych w publikacji (34 podtypy). Brałam również udział w przygotowaniu tekstu publikacji oraz części figur (fig. 4, fig. 5, fig. 8, fig. 11, fig. 14, fig. 17).

H4. Leśniak, D.; Podlewska, S.*; Jastrzębski, S.; Sieradzki, I.; Bojarski, A. J.; Tabor, J. Development of new methods needs proper evaluation – benchmarking sets for machine learning experiments for class A GPCRs, *J. Chem. Inf. Model.* **2019**, *59*, 4974–4992, IF₂₀₁₉ = 4,549, liczba punktów MEiN = 100.

W publikacji **H4** pełniłam rolę koordynatora projektu, brałam udział w opracowywaniu koncepcji badań oraz przeprowadziłam doświadczenia wstępne na ograniczonym zbiorze danych. Brałam również udział w analizie wyników oraz dokonałam ich interpretacji. Przygotowałam również wstępną wersję manuskryptu wraz z figurami (jestem autorką następujących figur: 1, 2, 6). Prowadziłam także korespondencję z edytorem *Journal of Chemical Information and Modeling* oraz przygotowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H5. Jastrzębski, S.; Szymczak, M.; Pocha, A.; Mordalski, S.; Tabor, J.; Bojarski, A. J.; Podlewska S.* Emulating Docking Results Using a Deep Neural Network: A New Perspective for Virtual Screening. *J. Chem. Inf. Model.* **2020**, *60*, 4246–4262, IF₂₀₂₀ = 4,956, liczba punktów MEiN = 100.

Publikacja **H5** jest rezultatem zaprojektowanych przeze mnie badań związanych z opracowaniem protokołu do przewidywania wyników dokowania. Poza zaplanowaniem i koordynowaniem prac, przygotowałam zestawy związków (ligandów i związków nieaktywnych), przeprowadziłam procedury dokowania do odpowiednich receptorów w programie Glide, przekształciłam wyniki dokowania do postaci zero-jedynkowej umożliwiającej przygotowanie modeli uczenia maszynowego, dokonałam oceny skuteczności

predykcji opracowanego protokołu. Ponadto, brałam udział w analizie wyników i ich interpretacji. Przygotowałam także tekst manuskryptu wraz z figurami (z wyłączeniem fig. 10 i fig. 12). Prowadziłam także korespondencję z edytorem *Journal of Chemical Information and Modeling* oraz przygotowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H6. Podlewska, S.; Bugno, R.; Kudła, L.; Bojarski, A. J.; Przewlocki, R. Molecular Modeling of μ Opioid Receptor Ligands with Various Functional Properties: PZM21, SR-17018, Morphine, and Fentanyl—Simulated Interaction Patterns Confronted with Experimental Data. *Molecules*, **2020**, *25*, 4636, IF₂₀₂₀ = 4,411, liczba punktów MEiN = 140.

Mój wkład pracy w publikację polegał na przeprowadzeniu badań *in silico*, tj. charakterystyce dostępnych kryształów receptorów opioidowych, zadokowaniu badanych związków (PZM21, SR-17018, morfiny, fentanylu) oraz związków referencyjnych (BF0, BU72) do wybranych struktur krystalicznych receptora opioidowego (4DKL, 5C1M, 6DDF), analizie uzyskanych pól oraz przygotowaniu i przeprowadzeniu eksperymentów dynamiki molekularnej. Opracowałam także metodę analizy wyników dynamiki molekularnej polegającą na wyznaczeniu korelacji pomiędzy częstością oddziaływania związków z poszczególnymi aminokwasami a wynikami doświadczeń *in vitro* i zastosowałam ją do otrzymanych danych. Brałam również udział w opracowaniu koncepcji badań, interpretacji uzyskanych wyników i przygotowaniu manuskryptu (fragmenty tekstu odnoszące się do badań obliczeniowych oraz figur 1–9).

H7. Podlewska, S., Latacz, G.; Łażewska, D.; Kieć-Kononowicz, K.; Handzlik, J. *In silico* and *in vitro* studies on interaction of novel non-imidazole histamine H3R antagonists with CYP3A4. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2020**, *30*, 127147, IF₂₀₂₀ = 2,823, liczba punktów MEiN = 70.

W publikacji **H7** pełniłam rolę pomysłodawcy i koordynatora projektu. Opracowałam koncepcję i plan badań, przeprowadziłam dokowanie oraz wykonałam symulacje dynamiki molekularnej dla wybranych ułożeń związków. Przeprowadziłam również statystyczną analizę uzyskanych wyników wraz z ich interpretacją i wizualizacją. Ponadto, brałam udział w przygotowaniu tekstu manuskryptu, a także jestem autorką wszystkich figur znajdujących się w przedstawionym artykule.

H8. Podlewska, S.*; Bugno, R.; Lacivita, E.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J.; Handzlik, J.* Low Basicity as a Characteristic for Atypical Ligands of Serotonin Receptor 5-HT₂. *Int. J. Mol. Sci.* **2021**, *22*, 1035, IF₂₀₂₀ = 5,924, liczba punktów MEiN = 140.

Mój wkład pracy w publikację polegał na przygotowaniu danych o ligandach o niskiej zasadowości na podstawie bazy ChEMBL, analizie statystycznej rozkładu parametru pK_a dla ligandów rozpatrywanych receptorów, analizie selektywności dla wybranych ligandów niskozasadowych, analizie zasadowości i aktywności poszczególnych grup strukturalnych ligandów, przygotowaniu modeli homologicznych rozpatrywanych receptorów (natywnych oraz ze zmutowaną resztą kwasu asparaginowego D3.32), przeprowadzeniu procedury dokowania oraz analizie statystycznej oddziaływań występujących dla rozpatrywanych grup ligandów (zasadowe/niezasadowe) z poszczególnymi aminokwasami. Dokonałam także interpretacji uzyskanych wyników, wykonałam ich wizualizacje (wszystkie figury

przedstawione w publikacji są mojego autorstwa) oraz brałam udział w przygotowaniu tekstu publikacji.

H9. Wojtuch, A.; Jankowski, R.; **Podlewska, S.*** How can SHAP values help to shape metabolic stability of chemical compounds? *J. Cheminf.*, **2021**, *13*, 74, IF₂₀₂₀ = 5,514, liczba punktów MEiN = 100.

W badaniach, których przeprowadzenie zaowocowało publikacją **H9** pełniłam rolę pomysłodawcy oraz koordynatora. Moją rolą było również przygotowanie odpowiednich zestawów danych do konstrukcji modeli predykcyjnych przewidujących stabilność metaboliczną wraz z ich wstępną analizą i przekształceniem do odpowiedniej postaci, wykonanie analizy i interpretacji uzyskanych wyników, a także zaprojektowanie serwisu online. Ponadto, przygotowałam manuskrypt (tekst oraz figury), jak również prowadziłam korespondencję z edytorem *Journal of Cheminformatics* oraz przygotowałam odpowiedzi na uwagi recenzentów.

H10. Baltrukevich, H.; **Podlewska, S.*** From data to knowledge: systematic review of tools for automatic analysis of molecular dynamics output. *Front. Pharmacol.* **2022**, *13*, 844293 (praca przeglądowa), IF₂₀₂₀ = 5,811, liczba punktów MEiN = 100.

Moją rolą w publikacji było dokonanie przeglądu literatury w zakresie automatycznych podejść do analizy wyników dynamiki molekularnej analiza danych jakościowych oraz przygotowanie następujących rozdziałów: „Machine learning - classes of models used in the structure-based drug design”, „Clustering and reduction of data dimensionality”, „Markov state modeling” oraz współtworzenie rozdziału „Examples of ML-based analysis of MD” i wniosków. Dokonałam również ostatecznej edycji całego manuskryptu, prowadziłam korespondencję z edytorem *Frontiers in Pharmacology* oraz wprowadziłam poprawki po uwagach recenzentów.

H11. Penna, E.‡; Niso, M.; **Podlewska, S.‡**; Volpicelli, F.; Crispino, M.; Perrone-Capano, C.; Bojarski, A. J.; Lacivita, E.; Leopoldo, M. In vitro and in silico analysis of the residence time of serotonin 5-HT₇ receptor ligands with arylpiperazine structure: a structure-kinetics relationship study. *ACS Chemical Neurosci.* **2022**, *13*, 497–509, IF₂₀₂₀ = 4,418, liczba punktów MEiN = 100.

Mój wkład pracy w publikację był związany z przeprowadzeniem badań modelowania molekularnego, tj. opracowaniem koncepcji badań pozwalających na wyjaśnienie obserwowanych parametrów kinetycznych związków, analizą wartości różnych deskryptorów molekularnych w odniesieniu do parametrów kinetycznych, dokowaniem związków do receptora serotoninowego 5-HT₇, przeprowadzeniem symulacji dynamiki molekularnej i analizą uzyskanych wyników. Zaproponowałam również wyjaśnienie obserwowanych zależności kinetycznych oraz przygotowałam fragment manuskryptu dotyczący modelowania molekularnego wraz z figurami (fig. 3, 4, 5).

‡ - równorzędny wkład

* - autor korespondencyjny

II. INFORMACJA O AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ

1. Wykaz opublikowanych monografii naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.1).

2. Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych.

a) Rozdziały opublikowane po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

Podlewska, S.; Bojarski, A. J. Post-processing of Docking Results: Tools and Strategies, In: *Molecular Docking for Computer-Aided Drug Design: Fundamentals, Techniques, Resources and Applications*, Coumar, M. S. (Ed), Elsevier **2021**, ISBN: 978-0-12-822312-3.

3. Informacja o członkostwie w redakcjach naukowych monografii.

4. Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.2).

a) Prace opublikowane przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

A.1. Lacivita, E.; **Podlewska, S.**; Speranza, L.; Niso, M.; Satała, G.; Perrone, R.; Perrone-Capano, C.; Bojarski, A. J.; Leopoldo, M. Structural modifications of the serotonin 5-HT₇ receptor agonist N-(4-cyanophenylmethyl)-4-(2-biphenyl)-1-piperazinehexanamide (LP-211) to improve in vitro microsomal stability: A case study, *Eur. J. Med. Chem.* **2016**, *120*, 363–379 (IF₂₀₁₆ = 4,519; 40 punktów MEiN).

A.2. Kucwaj-Brysz, K.; Warszycki, D.; **Podlewska, S.**; Witek, J.; Witek, K.; González Izquierdo, A.; Satała, G.; Loza, M. I.; Lubelska, A.; Latz, G.; Bojarski, A. J.; Castro, M.; Kieć-Kononowicz, K.; Handzlik, J. Rational design in search for 5-phenylhydantoin selective 5-HT₇R antagonists. Molecular modeling, synthesis and biological evaluation, *Eur. J. Med. Chem.* **2016**, *112*, 258–269 (IF₂₀₁₆ = 4,519; 40 punktów MEiN).

A.3. Czarnecki, W.M.; **Podlewska, S.**; Bojarski, A. J. Extremely Randomized Machine Learning Methods for Compound Activity Prediction. *Molecules* **2015**, *11*, 20107–20117 (IF₂₀₁₅ = 2,465; 30 punktów MEiN).

A.4. Czarnecki, W. M.; **Podlewska, S.**; Bojarski, A. J. Robust optimization of SVM hyperparameters in the classification of bioactive compounds. *J. Cheminf.* **2015**, *7*:38, 1–15 (IF₂₀₁₅ = 3,949; 40 punktów MEiN).

A.5. Matys, A.; **Podlewska, S.**; Witek, K.; Witek, J.; Bojarski, A. J.; Schabikowski, J.; Otrębska-Machaj, E.; Latacz, G.; Szymańska, E.; Kieć-Kononowicz, K.; Molnar, J.; Amaral, L.; Handzlik, J. Imidazolidine-4-one derivatives in the search for novel chemosensitizers of Staphylococcus aureus MRSA: Synthesis, biological evaluation and molecular modeling studies. *Eur. J. Med. Chem.* **2015**, *101*, 313–325 (IF₂₀₁₅ = 3,902; 40 punktów MEiN).

A.6. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Satała, G.; Bojarski, A. J. Fingerprint-based consensus virtual screening towards structurally new 5-HT₆R ligands. *Bioorg Med Chem Lett.* **2015**, *25*, 1827–1830 (IF₂₀₁₅ = 2,486; 30 punktów MEiN).

A.7. **Smusz, S.**; Mordalski, S.; Witek, J.; Rataj, K.; Kafel, R.; Bojarski, A. J. Multi-Step Protocol for Automatic Evaluation of Docking Results Based on Machine Learning

Methods-A Case Study of Serotonin Receptors 5-HT₆ and 5-HT₇. *J. Chem. Inf. Model.* **2015**, *55*, 823–832 (IF₂₀₁₅ = 3,657; 40 punktów MEiN).

- A.8. Mordalski, S.; Witek, J.; **Smusz, S.**; Rataj, K.; Bojarski, A. J. Multiple conformational states in retrospective virtual screening – homology models vs. crystal structures: beta-2 adrenergic receptor case study. *J. Cheminf.* **2015**, *7*, 13 (IF₂₀₁₅ = 3,949; 40 punktów MEiN).
- A.9. **Smusz, S.**; Czarnecki, W. M.; Warszycki, D.; Bojarski, A. J. Exploiting uncertainty measures in compounds activity prediction using support vector machines. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2015**, *25*, 100–105 (IF₂₀₁₅ = 2,486; 30 punktów MEiN).
- A.10. Witek, J.; **Smusz, S.**; Rataj, K.; Mordalski, S.; Bojarski, A. J. An application of machine learning methods to structural interaction fingerprints—a case study of kinase inhibitors. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2014**, *24*, 580–585 (IF₂₀₁₄ = 2,420; 30 punktów MEiN).
- A.11. Kurczab, R.; **Smusz, S.**; Bojarski, A. J. The influence of negative training set size on machine learning-based virtual screening. *J. Cheminf.* **2014**, *6*, 32 (IF₂₀₁₄ = 4,547; 40 punktów MEiN).
- A.12. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J. A multidimensional analysis of machine learning methods performance in the classification of bioactive compounds. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* **2013**, *128*, 89–100 (IF₂₀₁₃ = 2,381; 35 punktów MEiN).
- A.13. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J. The influence of the inactives subset generation on the performance of machine learning methods. *J. Cheminf.* **2013**, *5*, 17 (IF₂₀₁₃ = 4,540; 40 punktów MEiN).

b) Prace opublikowane po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

- B.1. Baltrukovich, H.; **Podlewska, S.**; From data to knowledge:– systematic review of tools for automatic analysis of molecular dynamics output, *Front. Pharmacol.* **2022**, *13*, 844293 (IF₂₀₂₀ = 5,811; 100 punktów MEiN) [H10].
- B.2. Penna, E.; Niso, M.; **Podlewska, S.**; Volpicelli, F.; Crispino, M. ; Perrone-Capano, C.; Bojarski, A. J.; Lacivita, E.; Leopoldo, M. In vitro and in silico analysis of the residence time of serotonin 5-HT₇ receptor ligands with arylpiperazine structure: a structure-kinetics relationship study, *ACS Chemical Neurosci*, **2022**, *13*, 497–509 (IF₂₀₂₀ = 4,418; 100 punktów MEiN) [H11].
- B.3. Kudla, L.; Bugno, R.; **Podlewska, S.**; Szumiec, L.; Wiktorowska, L.; Bojarski, A. J.; Przewlocki, R. Comparison of an addictive potential of μ -opioid receptor agonists with G protein bias: behavioral and molecular modeling studies, *Pharmaceutics*, **2022**, *14*, 55 (IF₂₀₂₀ = 6,321; 100 punktów MEiN).
- B.4. Szczepańska, K.; **Podlewska, S.**; Dichiaro, M.; Gentile, D.; Patamia, V.; Rosier, N.; Mönnich, D.; Ruiz-Cantero, M. C.; Karcz, T.; Łażewska, D.; Siwek, A.; Pockes, S.; Cobos, E. J.; Marrazzo, A.; Stark, H.; Rescifina, A.; Bojarski, A. J.; Amata, E.; Kiec-Kononowicz, K. Structural and molecular insight into piperazine and piperidine derivatives as histamine H₃ and sigma-1 receptor antagonists with promising antinociceptive properties, *ACS Chem. Neurosci.* **2022**, *13*, 1-15 (IF₂₀₂₀ = 4,418; 100 punktów MEiN).
- B.5. Kucwaj-Brysz, K.; Dela, A.; **Podlewska, S.**; Bednarski, M.; Siwek, A.; Satała, G.; Czarnota, K.; Handzlik, J.; Kieć-Kononowicz, K. The structural determinants for

α 1-adrenergic/serotonin receptors activity among phenylpiperazine-hydantoin derivatives. *Molecules*, **2021**, *26*, 7025 (IF₂₀₂₀ = 4,411; 140 punktów MEiN).

- B.6. Wojtuch, A.; Jankowski, R.; **Podlewska, S.** How can SHAP values help to shape metabolic stability of chemical compounds? *J. Cheminf.*, **2021**, *13*, 74 (IF₂₀₂₀ = 5.514, 100 punktów MEiN) [H9].
- B.7. Głowacka, I. E.; Grabowska-Dużyc, M.; Andrei, G.; Schols, D.; Snoeck, R.; Witek, K.; **Podlewska, S.**; Handzlik, J.; Piotrowska, D. G. Novel N-substituted 3-aryl-4-(diethoxyphosphoryl)azetidin-2-ones as antibiotic enhancers and antiviral agents in search for a successful treatment of complex infections *Int. J. Mol. Sci.* **2021**, *22*, 8032 (IF₂₀₂₀ = 5,923, 140 punktów MEiN).
- B.8. **Podlewska, S.**; Bugno, R.; Lacivita, E.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J.; Handzlik, J. Low Basicity as a Characteristic for Atypical Ligands of Serotonin Receptor 5-HT₂ *Int. J. Mol. Sci.* **2021**, *22*, 1035 (IF₂₀₂₀ = 5,923, 140 punktów MEiN) [H8].
- B.9. **Podlewska, S.**; Kurczab, R. Mutual Support of Ligand- and Structure-Based Approaches—To What Extent We Can Optimize the Power of Predictive Model? Case Study of Opioid Receptors *Molecules* **2021**, *26*, 1607 (IF₂₀₂₀ = 4,411; 140 punktów MEiN).
- B.10. Kaczor, A.; Witek, K.; **Podlewska, S.**; Sinou, V.; Czekańska, J.; Żesławska, E.; Doroz-Płonka, A.; Lubelska, A.; Latacz, G.; Nitek, W.; Bischoff, M.; Alibert, S.; Pagès, J.-M.; Jacob, C.; Karczewska, E.; Bolla, J.-M.; Handzlik, J. Molecular Insights into an Antibiotic Enhancer Action of New Morpholine-Containing 5-Arylideneimidazolones in the Fight against MDR Bacteria. *Int. J. Mol. Sci.* **2021**, *22*, 2062 (IF₂₀₂₀ = 5,923; 140 punktów MEiN).
- B.11. Minias, A.; Żukowska, L.; Lechowicz, E.; Gąsior, F.; Knast, A.; **Podlewska, S.**; Dziadek, J. Early drug development and evaluation of putative antitubercular compounds in the -omics era. *Front. Microbiol.* **2021**, *11*, 618168 (IF₂₀₂₀ = 5,640; 100 punktów MEiN).
- B.12. Szczepańska, K.; Pockes, S.; **Podlewska, S.**; Höring, C.; Mika, K.; Latacz, G.; Bednarski, M.; Siwek, A.; Karcz, T.; Nagl, M.; Bresinsky, M.; Mönnich, D.; Seibel, U.; Kuder, K. J.; Kotańska, M.; Stark, H.; Elz, S.; Kieć-Kononowicz, K. Structural modifications in the distal, regulatory region of histamine H₃ receptor antagonists leading to the identification of a potent anti-obesity agent *Eur. J. Med. Chem.* **2021**, *213*, 113041 (IF₂₀₂₀ = 6,514; 140 punktów MEiN).
- B.13. Kucwaj-Brysz, K.; Latacz, G.; **Podlewska, S.**; Żesławska, E.; Handzlik, J.; Lubelska, A.; Satała, G.; Nitek, W.; Handzlik, J. The relationship between stereochemical and both, pharmacological and ADME-Tox, properties of the potent hydantoin 5-HT₇R antagonist MF-8 *Bioorg. Chem.* **2021**, *106*, 104466 (IF₂₀₂₀ = 5,275; 100 punktów MEiN).
- B.14. **Podlewska, S.**; Bugno, R.; Kudła, L.; Bojarski, A. J.; Przewlocki, R. Molecular Modeling of μ Opioid Receptor Ligands with Various Functional Properties: PZM21, SR-17018, Morphine, and Fentanyl—Simulated Interaction Patterns Confronted with Experimental Data *Molecules*, **2020**, *25*, 4636 (IF₂₀₂₀ = 4,411; 100 punktów MEiN) [H6].

- B.15. Rajda K.; **Podlewska S.** Similar, or dissimilar, that is the question. How different are methods for comparison of compounds similarity? *Comput. Biol. Chem.* **2020**, *88*, 107367 (IF₂₀₂₀ = 2,877; 70 punktów MEiN).
- B.16. Jastrzębski, S.; Szymczak, M.; Pocha, A.; Mordalski, S.; Tabor, J.; Bojarski, A. J.; **Podlewska S.** Emulating Docking Results Using a Deep Neural Network: A New Perspective for Virtual Screening. *J. Chem. Inf. Model.* **2020**, *60*, 4246–4262 (IF₂₀₂₀ = 4,956; 100 punktów MEiN) [H5].
- B.17. **Podlewska, S.**, Latacz, G.; Łażewska, D.; Kieć-Kononowicz, K.; Handzlik, J. In silico and in vitro studies on interaction of novel non-imidazole histamine H3R antagonists with CYP3A4. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* **2020**, *30*, 127147 (IF₂₀₂₀ = 2,823; 70 punktów MEiN) [H7].
- B.18. Sieradzki, I.; Lesniak, D.; **Podlewska, S.** How Sure Can We Be about ML Methods-Based Evaluation of Compound Activity: Incorporation of Information about Prediction Uncertainty Using Deep Learning Techniques. *Molecules*, **2020**, *25*, 1452 (IF₂₀₂₀ = 4,411; 140 punktów MEiN).
- B.19. Leśniak, D.; **Podlewska, S.***; Jastrzębski, S.; Sieradzki, I.; Bojarski, A. J. ; Tabor, J. Development of new methods needs proper evaluation – benchmarking sets for machine learning experiments for class A GPCRs, *J. Chem. Inf. Model.* **2019**, *59*, 4974–4992 (IF₂₀₁₉ = 4,549; 100 punktów MEiN) [H4].
- B.20. Jastrzębski, S.; Sieradzki, I.; Leśniak, D.; Tabor, J.; Bojarski, A. J. ; **Podlewska, S.** Three-dimensional descriptors for aminergic GPCRs: dependence on docking conformation and crystal structure, *Mol. Divers.* **2019**, *23*, 603–613 (IF₂₀₁₉ = 2,013; 70 punktów MEiN).
- B.21. Kaczor, A.; Witek, K.; **Podlewska, S.**; Czekajewska, J.; Lubelska, A.; Żesławska, E.; Nitek, W.; Latacz, G.; Alibert, S.; Pages, J-M.; Karczewska, E.; Kieć-Kononowicz, K.; Handzlik, J. 5-Arylideneimidazolones with Amine at Position 3 as Potential Antibiotic Adjuvants against Multidrug Resistant Bacteria *Molecules* **2019**, *24*, 438 (IF₂₀₁₉ = 3,267; 140 punktów MEiN).
- B.22. Vass, M.*; **Podlewska, S.***; de Esch, I.J.P.; Bojarski, A. J.; Leurs, R.; Kooistra, A. J.; de Graaf, C. Aminergic GPCR–Ligand Interactions: A Chemical and Structural Map of Receptor Mutation Data, *J. Med. Chem.* **2019**, *62*, 3784–3839 (IF₂₀₁₉ = 6,205; 200 punktów MEiN) [H3].
- B.23. Rataj K.; Czarnecki, W.; **Podlewska, S.**; Pocha, A.; Bojarski, A. J. Substructural Connectivity Fingerprint and Extreme Entropy Machines—A New Method of Compound Representation and Analysis. *Molecules* **2018**, *23*, 1242 (IF₂₀₁₈ = 3,060; 30 punktów MEiN).
- B.24. **Podlewska, S.**; Kafel, R.; Lacivita, E.; Satała, G.; Kooistra, A. J.; Vass, M.; de Graaf, C.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J.; Mordalski, S. Structural insights into serotonin receptor ligands polypharmacology. *Eur. J. Med. Chem.*, **2018**, *151*, 797–814 (IF₂₀₁₈ = 4,833; 40 punktów MEiN) [H2].
- B.25. **Podlewska, S.**; Kafel, R. MetStabOn – online platform for metabolic stability predictions. *Int. J. Mol. Sci.* **2018**, *19*, 1040 (IF₂₀₁₈ = 4,183; 30 punktów MEiN).
- B.26. **Podlewska, S.**; Czarnecki, W.; Kafel, R.; Bojarski, A. J. Creating the New from the Old: Combinatorial Libraries Generation with Machine-Learning-Based Compound

Structure Optimization. *J. Chem. Inf. Model.* **2017**, *57*, 133–147 (IF₂₀₁₇ = 3,804; 40 punktów MEiN) [H1].

B.27. Leśniak, D.; Jastrzębski, S.; **Podlewska, S.**; Czarnecki, W. M.; Bojarski, A. J. Quo vadis G protein-coupled receptor ligands? A tool for analysis of the emergence of new groups of compounds over time. *Bioorg Med Chem Lett.* **2017**, *27*, 626–631 (IF₂₀₁₇ = 2,442; 30 punktów MEiN).

5. Wykaz osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).
6. Wykaz publicznych realizacji dzieł artystycznych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.3).
7. Informacja o wystąpieniach na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych.

a) Wystąpienia przedstawione przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

Wystąpienia ustne

1. **Podlewska, S.**; Kooistra, A. J. ; Vass, M.; Kafel, R.; Bojarski, A. J.; de Graaf, C. Zdefiniowanie wymagań strukturalnych dla selektywności pomiędzy wybranymi podtypami receptorów serotoninowych a receptorem histaminowym H₁; VI Konferencja Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego – Collegium Medicum, 23.04.2016, Kraków, Poland, Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Numer 12 (1/2016), Bartłomiej Jałocha, Wojciech Tomczyk, Eds., e-ISSN 2082-3827, p-ISSN 2084-977X, str. 100.
2. **Podlewska, S.**; Kurczab, R.; Satała, G.; Bojarski, A. J. New non-basic ligands of serotonin receptor 5-HT₆ as a result of virtual screening based on machine-learning methods; VII Conservatory on Medicinal Chemistry, 17-19.09.2015, Lublin, Poland, Book of Abstracts, PP5.
3. **Smusz, S.**; Witek, J.; Matys, A.; Handzlik, J.; Bojarski, A. J; Kieć-Kononowicz, K.; Wyjaśnienie mechanizmu znoszenia lekooporności przez pochodne 5-arylidenoimidazolonu za pomocą metod modelowania molekularnego, IV Konferencja Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego – Collegium Medicum, 29-30.05.2014, Kraków, Poland, Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Numer 8 (1/2014), Anna Bogdała, Bartłomiej Jałocha, Ed., e-ISSN 2082-3827, p-ISSN 2084-977X, str. 30.
4. **Smusz, S.**; Protokół do automatycznej oceny wyników dokowania oparty o metody uczenia maszynowego; Dokonania Naukowe Doktorantów II Edycja, 12.04.2014, Kraków, Poland, Book of Abstracts, p. 227 (ISBN 978-83-63058-40-1).
5. **Smusz, S.**; Czarnecki, W.; Bojarski, A. J.; The influence of the SVM metaparameters selection on the compounds' activity prediction, Seminar of the Group of Machine Learning Research JU, 13.03.2014, Krakow, Poland

6. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J.; Composition of the set of inactives and the performance in the classification of bioactive compounds by machine learning methods; 5th Symposium of the Polish Bioinformatics Society, 25-27.05.2012, Gdańsk, Poland, Book of Abstracts, p. Talk3.
7. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J.; Machine learning methods as virtual screening tools in computer-aided drug design; XXXIII Ogólnopolska Szkoła Chemii, 10-14.11.2010, Jastrzębia Góra, Poland, Book of Abstracts, p.35.

Prezentacje posterowe

1. **Podlewska, S.**; Mordalski, S.; Lacivita, E.; Kafel, R.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J.; A winding road of metabolic stability predictions; Glisten 2016 Prague, 26-27.09.2016, Prague, Czech Republic, Book of Abstracts, p. 51.
2. **Podlewska, S.**; Lacivita, E.; Kafel, R.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J. The service of in silico methods in the development of metabolically stable ligands; VIII Conversatory on Medicinal Chemistry, 15-17.09.2016, Lublin, Poland, Book of Abstracts, P96.
3. Lacivita, E.; **Podlewska, S.**; Speranza, L.; Niso, M.; Satała, G.; Perrone, R.; Perrone-Capano, C.; Bojarski, A. J. ; Leopoldo, M. Towards new 5-HT₇R ligands with improved metabolic stability – synthesis of LP-211 derivatives and their comprehensive evaluation in silico and in vitro; The 2nd Central European Biomedical Congress „From emerging biochemical strategies to personalized medicine”, 15-18.06.2016, Kraków, Poland, Book of Abstracts, p. 122.
4. **Podlewska, S.**; Vass, M.; Kooistra, A. J. ; Kafel, R.; Bojarski, A. J.; de Graaf, C. Aminergic GPCRs from a site-directed mutagenesis perspective – analysis and prediction; The 2nd Central European Biomedical Congress „From emerging biochemical strategies to personalized medicine”, 15-18.06.2016, Kraków, Poland, Book of Abstracts, p. 123.
5. **Podlewska, S.**; Czarnecki, W.M.; Kafel, R.; Bojarski, A. J. Teaching an old dog new tricks – optimized fingerprint as a basis for new compounds formation; GLISTEN Erlangen 2016 Conference, 06-08.04.2016, Erlangen, Germany, Book of Abstracts, P-62.
6. Mordalski, S.; Witek, J.; **Podlewska, S.**; Rataj, K.; Bojarski, A. J. Multiple conformational states in retrospective virtual screening – homology models vs. crystal structures. Beta-2 adrenergic receptor case study; GLISTEN Amsterdam 2015 Conference, 12-13.10.2015, Amsterdam, the Netherlands, Book of Abstracts, P08.
7. **Podlewska, S.**; Warszycki, D.; Bojarski, A. J. Because two is always better than one – towards the search of dual 5-HT_x-SERT ligands; GLISTEN Amsterdam 2015 Conference, 12-13.10.2015, Amsterdam, the Netherlands, Book of Abstracts, P36.
8. Rataj, K.; Czarnecki, W.; **Podlewska, S.**; Bojarski, A. J. Structural connectivity fingerprints – a new way to represent and classify compounds; GLISTEN Amsterdam 2015 Conference, 12-13.10.2015, Amsterdam, the Netherlands, Book of Abstracts, P50.
9. Rataj, K.; Czarnecki, W.; **Podlewska, S.**; Bojarski, A. J. Structural connectivity fingerprints – a new method of compound representation; VII Conversatory on Medicinal Chemistry, 17-19.09.2015, Lublin, Poland, Book of Abstracts, P83.

10. **Podlewska, S.**; Lacivita, E.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J. Tools for *in silico* evaluation of cytochrome P450-mediated compounds metabolism, V Meeting of the Paul Ehrlich MedChem Euro-PhD Network, 03-05.07.2015, Kraków, Book of Abstracts, p. 85.
11. **Podlewska, S.**; Lacivita, E.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J. Narzędzia do oceny stabilności metabolicznej *in silico*. V Konferencja Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego – Collegium Medicum, 25-26.05.2015, Kraków, Poland, Zeszyty Naukowe Towarzystwa Doktorantów Uniwersytetu Jagiellońskiego, Numer 10 (1/2015), Bartłomiej Jałocha, Ed., e-ISSN 2082-3827, p-ISSN 2084-977X, str. 112.
12. **Smusz, S.**; Witek, J.; Rataj, K.; Mordalski, S.; Bojarski, A. J.; Structural interaction profiles combination as a method for optimization of its application in docking results analysis – beta-2 adrenergic receptor case study; The GLISTEN Budapest 2014 Conference, 02-04.10.2014, Budapest, Hungary, Book of Abstracts, P412.
13. Lacivita, E.; Niso, M.; **Smusz, S.**; Satała, G.; Bojarski, A. J.; Leopoldo, M.; Novel potent serotonin 5-HT₇ receptor ligands: structural modification to improve pharmacokinetic properties and *in silico* prediction model; The GLISTEN Budapest 2014 Conference, 02-04.10.2014, Budapest, Hungary, Book of Abstracts, P408.
14. Kucwaj-Brysz, K.; Warszycki, D.; Witek, J.; **Smusz, S.**; Satała, G.; Bojarski, A. J.; Handzlik, J.; Kieć-Kononowicz, K.; Hydantoin derivatives as selective serotonin 5-HT₇ receptor ligands; The GLISTEN Budapest 2014 Conference, 02-04.10.2014, Budapest, Hungary, Book of Abstracts, P416.
15. Rataj, K.; Czarnecki, W.; **Smusz, S.**; Bojarski, A. J.; 2-Dimensional substructural fingerprints – a novel method of compound structure representation; VIth Conservatory on Medicinal Chemistry, 18-20.09.2014, Lublin, Poland, Book of Abstracts, p. 148.
16. Witek, J.; **Smusz, S.**; Rataj, K.; Mordalski, S.; Bojarski, A. J.; Combination of structural interaction profiles as a method for optimization of its application in docking results analysis; VIth Conservatory on Medicinal Chemistry, 18-20.09.2014, Lublin, Poland, Book of Abstracts, p. 157.
17. Kucwaj-Brysz, K.; Warszycki, D.; **Smusz, S.**; Witek, J.; Satała, G.; Bojarski, A. J.; Handzlik, J.; Kieć-Kononowicz, K.; The structure-selectivity relationship studies for hydantoin-derived 5-HT₇R ligands; VIth Conservatory on Medicinal Chemistry, 18-20.09.2014, Lublin, Poland, Book of Abstracts, p. 103.
18. Lacivita, E.; Niso, M.; **Smusz, S.**; Satała, G.; Perrone, R.; Bojarski, A. J.; Leopoldo, M.; Towards metabolically stable serotonin 5-HT₇ receptor ligands: structural modification of LP-211 and *in silico* prediction model, XXV Congresso Nazionale della Societa Chimica Italiana, 07-12.09.2014, Arcavacata di Rende, Italy, Book of Abstracts, p. 359.
19. **Smusz, S.**; Mordalski, S.; Witek, J.; Rataj, K.; Bojarski, A. J.; A machine learning-based for docking results analysis; The 10th International Conference on Chemical Structures, 1-5.06.2014, Noordwijkerhout, the Netherlands, Book of Abstracts, p.143.
20. Witek, J.; **Smusz, S.**; Rataj, K.; Mordalski, S.; Bojarski, A. J.; An application of ligand interaction profiles as a novel approach in virtual screening of GPCR ligands; Barcelona GPCR Spring Conference 2014, 28-30.04.2014, Barcelona, Spain, Book of Abstracts, p. 26.
21. **Smusz, S.**; Czarnecki, W.; Warszycki, D.; Bojarski, A. J.; Uncertainty of the *in vitro* experiments in the predictive models construction; Barcelona GPCR Spring Conference 2014, 28-30.04.2014, Barcelona, Spain, Book of Abstracts, p. 32.

22. Rataj, K.; Czarnecki, W.; **Smusz, S.**; Bojarski, A. J.; 2D fingerprints – a new way of chemical structure description; Barcelona GPCR Spring Conference 2014, 28-30.04.2014, Barcelona, Spain, Book of Abstracts, p. 31.
23. Kurczab, R.; **Smusz, S.**; Zastosowanie metod chem- i bioinformatycznych w nowoczesnym projektowaniu nowych leków; I Ogólnopolskie Sympozjum Interdyscyplinarne Inter-Mix 2013, 21-24.03.2013, Pułtusk, Poland, Book of Abstracts, p.34.
24. Kujawski, J.; Popielarska, H.; Drabińska, B.; Myka, A.; **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J.; Synthesis and complexation abilities of new indazole derivatives with expected cytostatic activity; 15th JCF-Fruhjahrssymposium, 06-09.03.2013, Berlin, Germany, Book of Abstracts, p.238.
25. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J.; The insight on molecular fingerprint nature – how to enhance the virtual screening performance?; VIIIth Joint Meeting on Medicinal Chemistry, 30.06-04.07.2013, Lublin, Poland, Book of Abstracts, p.P-46.
26. **Smusz, S.**; Mordalski, S.; Witek, J.; Rataj, K.; Bojarski, A. J.; Automatic evaluation of complexes of ligands with serotonin receptors based on the application of machine learning methods; GPCR-Ligand Interactions, Structures, and Transmembrane Signalling: a European Research Network, 07-09.10.2013, Warsaw, Poland.
27. Witek, J.; **Smusz, S.**; Rataj, K.; Mordalski, S.; Bojarski, A. J.; An application of machine learning methods to Structural Interaction Fingerprints as a novel approach in the search for biologically active compounds; GPCR-Ligand Interactions, Structures, and Transmembrane Signalling: a European Research Network, 07-09.10.2013, Warsaw, Poland.
28. Mordalski, S.; Witek, J.; Rataj, K.; **Smusz, S.**; Bojarski, A. J.; Automated docking restrains assignment based on interaction profiles; GPCR Workshop 2013, 01-05.12.2013, Maui, Hawaii, USA, Book of Abstracts, p.54.
29. **Smusz, S.**; Mordalski, S.; Witek, J.; Rataj, K.; Bojarski, A. J.; A novel machine learning-based protocol for predicting biological activity of chemical compounds; GPCR Workshop 2013, 01-05.12.2013, Maui, Hawaii, USA, Book of Abstracts, p.58.
30. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J. ; Composition of the set of inactives and the performance in the classification of bioactive compounds by machine learning methods; 5th Symposium of the Polish Bioinformatics Society, 25-27.05.2012, Gdańsk, Poland, Book of Abstracts, p. Talk3.
31. Mordalski, S.; Witek, J.; Rataj, K.; **Smusz, S.**; Bojarski, A. J. ; A SIFt-guided approach to docking restrains assignment. An application to Virtual Screening; Book of Abstracts, 5th Symposium of the Polish Bioinformatics Society, 25-27.05.2012, Gdańsk, Poland, p.Talk10.
32. Mordalski, S.; **Smusz, S.**; Esmailbeiki, R.; Bojarski, A. J. ; Feature selection for structure based pharmacophore model by means of Structural Interaction Fingerprint and 3D motif; The 5th Conservatory of Medicinal Chemistry, 13-15.09.2012, Lublin, Poland, Book of Abstracts, p.P-95.
33. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J. ; Machine Learning Method as a Tool for Searching New 5-HT₆ Ligands in Fingerprint-Based Consensus Experiment; The 5th Conservatory of Medicinal Chemistry, 13-15.09.2012, Lublin, Poland, Book of Abstracts, p.P-65.

34. Rataj, K.; Witek, J.; Mordalski, S.; Kristiansen, K.; **Smusz, S.**; Bojarski, A. J. ; Mutation Mining: Automated Extraction of Mutation Data from Scientific Publications; The 5th Conservatory of Medicinal Chemistry, 13-15.09.2012, Lublin, Poland, Book of Abstracts, p.P-59.
35. **Smusz, S.**; Kurczab., R; Bojarski, A. J. The influence of hashed fingerprints density on the machine learning methods performance, The 8. German Conference on Cheminformatics, 11-13.11.2012, Goslar, Niemcy, Book of Abstracts: P-27.
36. Witek, J.; Rataj, K.; **Smusz, S.**; Mordalski, S.; Kosciolatek, T. Bojarski A. J. Application of Structural Interaction Fingerprints into post-docking analysis – insight into activity and selectivity, The 8. German Conference on Cheminformatics, 11-13.11.2012, Goslar, Niemcy, Book of Abstracts: P-30.
37. Kurczab, R.; **Smusz, S.**; Bojarski A. J. The influence of training actives/inactives ratio on machine learning performance, The 8. German Conference on Cheminformatics, 11-13.11.2012, Goslar, Niemcy, Book of Abstracts: P-32.
38. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Warszycki, D.; Kościółek, T.; Mordalski, S.; Bojarski, A. J. ; Hybridization of ligands as a way of generating combinatorial libraries of drug candidates; Spring Congress of Polish Chemical Society Student Section, 13-17.04.2011, Murzasichle, Poland, Book of Abstracts, p.130.
39. **Smusz, S.**; Kurczab, R.; Bojarski, A. J. ; Meta-Learning as an Improvement of Machine Learning Methods Performance in Virtual Screening; The 4th Conservatory of Medicinal Chemistry, 08-10.09.2011, Lublin, Poland, Book of Abstracts, p.P-57.
40. Kurczab, R.; **Smusz, S.**; Bojarski, A. J. ; Evaluation of different Machine Learning Methods for Ligand-based Virtual Screening; German Conference on Cheminformatics, 07-09.11.2010, Goslar, Germany, Book of Abstracts, p.105.

b) Wystąpienia przedstawione po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

Wystąpienia ustne

1. **Podlewska, S.**; Bugno, R.; Kudla, L.; Bojarski, A. J.; Przewlocki, R. Signaling bias of the selected mu opioid receptor agonists – behavioral and molecular modeling studies. 6th ERNEST: Building a Comprehensive Map of GPCR Signal Transduction, 28-31.03.2022.
2. **Podlewska, S.**; Lacivita, E.; Leopoldo, M.; Bojarski, A. J. ; Handzlik, J. Low basicity as a characteristic for atypical serotonin receptor ligands. Third Ernest Meeting - Online; Signal transduction: from the genomic to the systems level, 12-14.10.2020.
3. **Podlewska, S.** Machine learning in the serve of searching for new drugs, Theoretical Foundations of Machine Learning, 11-15.02.2019, Kraków, Poland.

Prezentacje posterowe

1. Danel T.; Wojtuch, A.; **Podlewska, S.**, Generation of new potential CYP inhibitors via automated structure modification and docking. 6th ERNEST: Building a Comprehensive Map of GPCR Signal Transduction, 28-31.03.2022.
2. Wojtuch, A.; Jankowski, R.; **Podlewska, S.** SHAP-based tools for ADMET compounds profiling on the example of metabolic stability optimization. 7th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry, 01-30.11.2021, <https://doi.org/10.3390/ECMC2021-11379>.

3. Kafel, R.; **Podlewska, S.** Optimization of ADMET properties – ligand- and structure-based approach. 7th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry, 01-30.11.2021, <https://doi.org/10.3390/ECMC2021-11464>.
4. **Podlewska, S.**; Kurczab, R. Machine-learning-based module for the design of polypharmacological drugs. 7th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry, 01-30.11.2021, <https://doi.org/10.3390/ECMC2021-11361>.
5. Pocha, A.; Jankowski, R.; **Podlewska, S.** Optimization of compound metabolic stability via SHAP, EFMC-YMCS 2021, 09-10.09.2021, Virtual, FP14.
6. Kurczab R.; Warszycki, D.; **Podlewska, S.**; Kafel, R.; Satała, G.; Mordalski, S.; Śmieja, M. SilicoPharm - AI-driven polypharmacological in silico screening platform for the next generation drugs, X Conversatory on Medicinal Chemistry, 03-05.09.2021, Lublin, Poland, Book of Abstracts, P41.
7. Głowacka, I. E.; Grabowska-Drużyc, M.; Witek, K.; **Podlewska, S.**; Handzlik, J.; Piotrowska, D. G. N-Benzyl-3-aryl-4-(diethoxyphosphoryl)azetid-2-ones as antibiotic enhancers, X Conversatory on Medicinal Chemistry, 03-05.09.2021, Lublin, Poland, Book of Abstracts, P54.
8. Pocha, A.; Jankowski, R.; **Podlewska, S.** Detection of structural features influencing compound physicochemical properties with the use of SHAP values, Paul Ehrlich Euro-PhD Network Virtual Meeting 2021, 26-28.07.2021, Book of Abstracts, PC_51.
9. Pocha, A.; Jankowski, R.; **Podlewska, S.** Optimization of metabolic stability of ligands of serotonin receptor 5-HT₇ using SHAP values, 1st International Electronic Conference on Biomedicine, 01-26.06.2021, <https://doi.org/10.3390/ECB2021-10258>
10. **Podlewska, S.**; Kafel, R. Optimization of pharmacokinetic compound profile of serotonin receptor ligands via machine learning, 1st International Electronic Conference on Biomedicine, 01.-26.06.2021, <https://doi.org/10.3390/ECB2021-10259>.
11. **Podlewska, S.**; Kafel, R. Optimization of compounds ADMET properties via machine-learning-based tools, 6th International Electronic Conference on Medicinal Chemistry, 06.11.2020, [10.3390/ECMC2020-07401](https://doi.org/10.3390/ECMC2020-07401).
12. Kafel, R.; **Podlewska, S.**; Not only affinity - machine-learning-based tools for optimization of ligand physicochemical properties, EFMC-ISMIC & EFMC-YMCS, 09.09.2020, Virtual Poster Session, Book of Abstracts, P133.
13. Pietruś, W.; **Podlewska, S.**; Bojarski, A.J.; Kurczab R. Development of machine-learning-based tools for gaining knowledge about polypharmacological profile of compounds, EFMC - ACSMEDI Medicinal Chemistry Frontiers, Kraków, 10-13.06.2019.
14. Wiercioch, M.; **Podlewska, S.** Automated De-novo Molecule Design Based on Deep Neural Networks, 14th German Conference on Chemoinformatics, 11-13.11.2018, Mainz, Germany, Book of Abstracts, P53.
15. **Podlewska, S.**; Mordalski, S.; Kafel, R.; Satała, G.; Bojarski, A. J. Defining structural requirements for selectivity towards serotonin receptor 5-HT₇, Nowe wyzwania dla polskiej nauki, 09.12.2017, Kraków, Poland, Book of Abstracts, p. 71.
8. [Informacja o udziale w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji.](#)

9. Informacja o uczestnictwie w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.

a) Udział w projektach badawczych przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

Kierowanie projektami badawczymi

1. 01.10.2015–30.09.2016 „Wykorzystanie metod uczenia maszynowego w zadaniach komputerowo wspomaganego projektowania leków” – Narodowe Centrum Nauki: ETIUDA Nr 2015/16/T/NZ2/00058, wysokość dofinansowania: 76 476 PLN
2. 12.04.2016–11.05.2018 „Poszukiwanie nowych struktur wiodących dla ligandów receptora serotoninowego 5-HT₇ o zwiększonej stabilności metabolicznej” – Narodowe Centrum Nauki: HARMONIA Nr 2015/18/M/NZ7/00377, wysokość dofinansowania: 243 120 PLN
3. 13.02.2014–12.02.2016 „Opracowanie narzędzia do automatycznej oceny kompleksów ligandów z receptorami serotoninowymi opartego o wykorzystanie metod uczenia maszynowego” – Narodowe Centrum Nauki: PRELUDIUM Nr 2013/09/N/NZ2/01917, wysokość dofinansowania: 97 500 PLN

Udział w projektach badawczych w charakterze wykonawcy

1. 27.01.2015–26.08.2017 „Paradygmat minimalizacji pamięci w klastrowaniu”, Narodowe Centrum Nauki, Nr 2014/13/B/ST6/01792 (OPUS), kierownik projektu: dr hab. Jacek Tabor (Wydział Matematyki i Informatyki Uniwersytetu Jagiellońskiego)
2. 01.11.2013–31.12.2015 “EXtention of academia-based PLATFORM to antidepressant hits discovery (PLATFORMex),” Narodowe Centrum Badań i Rozwoju: Nr Pol-Nor/198887/73/2013, kierownik projektu: prof. dr hab. Andrzej Bojarski (Polsko-Norweska Współpraca Badawcza)
3. 01.07.2013–31.12.2015 Allosterix “Innovative therapies for neurodegenerative and neurodevelopmental diseases based on mGlu receptor allosteric modulators”, Narodowe Centrum Badań i Rozwoju: Nr UDA-POIG.01.03.01-12-100/08-0, kierownik projektu w IF PAN: prof. dr hab. Andrzej Pilc
4. 17.05.2012–16.05.2014 „Zastosowanie profili SIFt w wirtualnym skryningu”, Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego: Nr 0046/DIA/2012/41, (Diamentowy Grant), kierownik projektu: Stefan Mordalski
5. 01.07.2011–31.12.2013 DeMeTer „Depresja-mechanizmy-terapia”, Nr POIG.01.01.02-12-004/09-00, kierownik projektu: prof. dr hab. Krzysztof Wędzony
6. 08.2012–08.2013 – „Wpływ gęstości fingerprintów na efektywność rozpoznawania chemicznych wzorców strukturalnych”, Narodowe Centrum Nauki: Nr 2011/03/N/NZ2/02478, (PRELUDIUM), kierownik projektu: mgr Rafał Kurczab
7. 01.07.2011–30.06.2013 – ProKog „Antagoniści receptora 5-HT₆: Nowoczesne leki przeciwpsychotyczne o dodatkowym działaniu prokognitywnym”, Nr UDA-POIG.01.03.01-12-063/09-02, kierownik projektu: prof. dr hab. Piotr Popik
8. 01.07.2011–31.03.2013 – ModAll „Modulacja allosteryczna – nowa strategia w farmakoterapii. Identyfikacja własności psychotropowych ligandów receptorów

glutaminianergicznych III grupy”, Nr UDA-POIG.01.03.01-12-100/08-0, kierownik projektu: prof. dr hab. Andrzej Pilc

9. 01.10.2010–31.06.2011 – „Stworzenie platformy do poszukiwania związków działających na układy serotonergiczny lub glutamatergiczny jako potencjalnych leków przeciwdepresyjnych lub przeciwlękowych”, Nr PNRF-103-AI-1/07, kierownik projektu: prof. dr hab. Andrzej Pilc (Polsko-Norweski Fundusz Badań Naukowych)

b) Udział w projektach badawczych po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

Kierowanie projektami badawczymi

1. 26.11.2019– „Opracowanie kompleksowego zestawu narzędzi obliczeniowych do poszukiwania ligandów określonego receptora na przykładzie receptora serotoninowego 5-HT₇” – Narodowe Centrum Nauki: OPUS Nr 2018/31/B/NZ2/00165, wysokość dofinansowania: 645 200 PLN
2. 15.10.2018–14.10.2021 „Rozwój grupy niezasadowych ligandów receptora serotoninowego 5-HT₇, pochodnych 2-(6-okso-3-fenilo-1,6-dihydropirydazyn-1-yl)-N-feniloacetamidu, o zwiększonej stabilności metabolicznej” – Narodowe Centrum Nauki: SONATINA Nr 2018/28/C/NZ7/00145, wysokość dofinansowania: 790 877 PLN

Udział w projektach badawczych w charakterze wykonawcy

1. Od 24.07.2019 – “Racjonalne projektowanie i ocena funkcjonalnie stronniczych agonistów receptorów opioidowych”, Narodowe Centrum Nauki: Nr 2018/31/B/NZ7/03954 (OPUS), kierownik projektu: prof. dr hab. Ryszard Przewłocki
2. Od 01.10.2020 – “Wykorzystanie wzorców ewolucyjnych w optymalizacji chemoterapii gruźlicy”, Narodowe Centrum Nauki: Nr 2019/34/E/NZ6/00221 (SONATA BIS), kierownik projektu: dr hab. Alina Minias (Instytut Biologii Medycznej PAN, Łódź)
3. 01.01.2019–30.06.2021 “Polifarmakologiczna platforma skringowa in silico”, Narodowe Centrum Badań i Rozwoju: Nr LIDER/37/0137/L-9/17/NCBR/2018, kierownik projektu: dr hab. Rafał Kurczab (LIDER)

10. Członkostwo w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.

a) Przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

- 2014–2016 – członek sieci naukowej GLISTEN: GPCR-Ligand Interactions, Structures, and Transmembrane Signalling: a European Research Network; COST Action CM1207

b) Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

- 2019–obecnie – członek sieci naukowej ERNEST: European Research Network on Signal Transduction; COST Action 18133

11. Informacja o odbytych stażach w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.

a) Staże odbyte przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora

1. Holandia, Wydział Chemii, Wolny Uniwersytet w Amsterdamie, staż w ramach programu ETIUDA (2015/16/T/NZ2/00058), 02.11.2015–01.03.2016
2. Włochy, Wydział Farmacji, Uniwersytet w Bari, wyjazd badawczy, 09–16.07.2015
3. Holandia, Wydział Chemii, Wolny Uniwersytet w Amsterdamie, wyjazd szkoleniowy, 14–20.06.2015
4. Holandia, Wydział Chemii, Wolny Uniwersytet w Amsterdamie, wyjazd badawczy, 23–27.02.2015
5. Szwajcaria, Wydział Chemii i Stosowanych Nauk Biologicznych, ETH Zürich, wyjazd szkoleniowy, 09–13.02.2015
6. Włochy, Wydział Farmacji, Uniwersytet w Bari, wyjazd badawczy, 17–25.11.2014
7. Norwegia, Zakład Biologii Medycznej, Uniwersytet w Tromsø, wyjazd badawczy, 12–21.09.2011

b) Staże odbyte po uzyskaniu stopnia naukowego doktora

1. Włochy, Wydział Farmacji, Uniwersytet w Bari, staż zagraniczny w ramach grantu SONATINA (2018/28/C/NZ7/00145), 10.02.2021–09.06.2021

12. Członkostwo w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.).

- Edytor wydania specjalnego czasopisma Molecules (wydawnictwo MDPI, IF₂₀₂₀ = 4,411) pt. „The Machine Learning Applications in the Discovery of New Bioactive Molecules” (współedytorzy: dr Stanisław Jastrzębski z Wydziału Matematyki i Informatyki UJ oraz Dr. Rita Guedes z Wydziału Farmaceutycznego Uniwersytetu Lizbońskiego), ostateczny termin na wysyłanie prac mija 31.05.2022.

13. Informacja o recenzowanych pracach naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.

W latach 2017-2022 przeprowadziłam 83 recenzje publikacji wysłanych do następujących czasopism:

a) z listy filadelfijskiej

- Molecules (19)
- Pharmaceuticals (15)
- Pharmacological Reports (9)
- ACS Omega (8)

- Mathematics (5)
- Journal of Chemical Information and Modeling (4)
- Applied Sciences (3)
- Frontiers in Bioinformatics (2)
- Catalysts (2)
- Toxins (1)
- Toxics (1)
- Symmetry (1)
- Royal Society Open Science (1)
- Life (1)
- Journal of Clinical Medicine (1)
- International Journal of Molecular Sciences (1)
- Food Chemistry (1)
- Energies (1)
- Computation (1)
- Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems (1)
- Biomolecules (1)
- Antibiotics (1)

b) spoza listy filadelfijskiej:

- Information (3)

14. Informacja o uczestnictwie w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych.

15. Informacja o udziale w zespołach badawczych, realizujących projekty inne niż określone w pkt. II.9.

16. Informacja o uczestnictwie w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań, wnioski o przyznanie nagród naukowych, wnioski w innych konkursach mających charakter naukowy lub dydaktyczny.

III. INFORMACJA O WSPÓŁPRACY Z OTOCZENIEM SPOŁECZNYM I GOSPODARCZYM

1. Wykaz dorobku technologicznego.
2. Informacja o współpracy z sektorem gospodarczym.
3. Uzyskane prawa własności przemysłowej, w tym uzyskane patenty, krajowe lub międzynarodowe.

4. Informacja o wdrożonych technologiach.
5. Informacja o wykonanych ekspertyzach lub innych opracowaniach wykonanych na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców.
6. Informacja o udziale w zespołach eksperckich lub konkursowych.
7. Informacja o projektach artystycznych realizowanych ze środowiskami pozaartystycznymi.

IV. INFORMACJE NAUKOMETRYCZNE

1. Informacja o punktacji Impact Factor (w dziedzinach i dyscyplinach, w których parametr ten jest powszechnie używany jako wskaźnik naukometryczny).
2. Informacja o liczbie cytowań publikacji wnioskodawcy, z oddzielnym uwzględnieniem autocytowań.
3. Informacja o posiadanym indeksie Hirscha.
4. Informacja o liczbie punktów MNiSW.

Sumaryczny Impact Factor wszystkich publikacji wynosi 116,912, natomiast całkowita liczba punktów MEiN wynosi 2085.

Według bazy Web of Science, moje publikacje mają 343 cytowania (na dzień 09.05.2022, w tym 315 bez autocytowań), natomiast indeks Hirscha jest równy 11.

Tabela 1. Podsumowanie dorobku

	Przed uzyskaniem stopnia naukowego doktora	Po uzyskaniu stopnia naukowego doktora	Razem
Publikacje naukowe w czasopismach z listy filadelfijskiej	13	27	40
Rozdziały w książkach	0	1	1
Wystąpienia ustne na krajowych konferencjach naukowych	7	0	7
Wystąpienia ustne na międzynarodowych konferencjach naukowych	0	3	3
Prezentacje posterowe na krajowych konferencjach naukowych	15	3	18
Prezentacje posterowe na międzynarodowych konferencjach naukowych	25	12	37

	7 (1 staż 4- miesięczny, 6 krótkoterminowych)	1 (staż 4-miesięczny)	8 (2 staże 4- miesięczne, 6 krótkoterminowych)
Staż zagraniczne			
Kierowanie projektami badawczymi	3 (suma finansowania: 417 096 PLN)	2 (suma finansowania: 1 436 077 PLN)	5 (suma finansowania: 1 853 173 PLN)
Udział w projektach badawczych w charakterze wykonawcy	9	3	12

Informacje zawarte w pkt. IV powinny wskazywać również na bazę danych, na podstawie której zostały podane.

Przy wyborze tej bazy należy zwracać uwagę na specyfikę dziedziny i dyscypliny naukowej, w której kandydat ubiega się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Rada Doskonałości Naukowej informuje, że podawanie danych naukometrycznych – w opinii Rady Doskonałości Naukowej – jest wskazane i zalecane, wynika to także ze stosowanej powszechnie praktyki przez samych kandydatów ubiegających się o awans naukowy. Należy jednak podkreślić, że podane we wnioskach o wszczęcie postępowania awansowego dane naukometryczne nie mogą stanowić kryterium oceny dorobku naukowego Kandydata dla podmiotów doktoryzujących, habilitujących oraz samej Rady Doskonałości Naukowej, organów prowadzących postępowania w sprawie nadania stopnia lub tytułu. Zadaniem tych organów jest przede wszystkim ocena ekspercka dorobku naukowego Kandydata ubiegającego się o awans naukowy, zaś decyzja o nadaniu stopnia lub tytułu nie powinna być uzależniona od podania tych danych.

.....

(podpis wnioskodawcy)