

Życiorys

Bogdan Lesyng

ICM oraz Wydział Fizyki
Uniwersytet Warszawski,
Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warszawa
e-mail: lesyng@icm.edu.pl
tel: +48-(22)-554 08 00
fax: +48-(22)-554 08 01
<http://www.icm.edu.pl/~lesyng/>

Data i miejsce urodzenia: 23/08/1948, Przyzórz, Polska

Wykształcenie:

1966 - 1971 Student, Wydział Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego
1972 Stopień magistra fizyki
1974 - 1977 Student informatyki, Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki UW
1972 - 1976 Doktorant, Wydział Fizyki UW
1976 Tytuł doktora nauk fizycznych, specjalizacja biofizyka molekularna
Wydz. Fizyki UW, promotor: Prof.J.S.Kwiatkowski
1985 Stopień doktora habilitowanego, Wydział Fizyki UW
1990 Stanowisko profesora UW
1997 Tytuł profesora

Doświadczenie zawodowe:

1976 Adiunkt, Zakład Biofizyki IFD, Wydział Fizyki UW
1977 - 1979 Stypendysta Fundacji Alexandra von Humboldta oraz
Instytutu Maxa-Planck'a, Goettingen, Niemcy
1980 - (3 mies.) Stypendysta Instytutu Max-Plancka, Goettingen, Niemcy
1981 - (3 mies.) Stypendysta Fundacji Alexander von Humboldta, Goettingen, Niemcy
1982 - (3 mies.) Staż naukowy, Service Biochim. et Biophys., Centre d'Etudes Nucleaires
de Saclay, Francja
1984 - (3 mies.) Staż naukowy, Institute fuer Kristallographie, Freie Universitaet Berlin,
Niemcy
1986 - 1987 "Visiting professor", University of Pittsburgh, PA, USA
1987 - 1988 "Visiting professor", Texas A & M University, TX, USA
1989 - 1999 Kilkanaście krótkich pobytów jako „visiting scientist” lub „visiting professor”

- University of Houston, Houston, USA;
- University of Alabama, Birmingham, USA;
- University of California, San Diego, USA .
- Freie Universitaet Berlin, Niemcy.

1989 - 1994 Kierownik Zakładu Biofizyki IFD, Uniwersytet Warszawski,
2000 - (3 mies.) "Senior Alexander von Humboldt Fellow" w:

- Freie Universitaet Berlin, Niemcy,
- Universitaet Heidelberg, Niemcy,
- Center of Advanced European Studies and Research, Bonn, Niemcy.

1995 - 2004 V-ce dyrektor Interdyscyplinarnego Centrum Modelowania Matematycznego
i Komputerowego na Uniwersytecie Warszawskim,
2003 - 2005 Kierownik europejskiego centrum doskonałości w ICM UW:
"CoE for Multiscale Biomolecular Modelling and Applications" (MAMBA),
<http://www.icm.edu.pl/mamba/>
2005 - Kierownik krajowego centrum doskonałości „BioExploratorium”.

Granty badawcze:

- 1991 – 94 Kierownik grantu KBN, P2.3, 4.0078.91.01, *Rozwijanie i stosowanie metod dynamiki i grafiki molekularnej w biofizyce i biotechnologii, w szczególności w badaniach struktur molekularnych kodowanych przez genom wirusa HIV-1.*
- 1993 Grant Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej, BIMOL 84/93, *Zakup grupowy licencji oprogramowania BIOSYM* (podstawa, przyszłej krajowej licencji oprogramowania).
- 1994 – 98 US – Poland Maria Skłodowska-Curie Fund, MEN/NSF – 92-112, *Development and Applications of Molecular Dynamics Simulation Techniques in Molecular Biophysics and Biotechnology* (grant z Prof. J. Andrew McCammonem, UCSD, La Jolla, USA).
- 1994 – 98 Kierownik grantu KBN, 8 T11F 006 09, *Rozwijanie i stosowanie metod molekularnego modelowania w badaniach procesów fosforylacji biopolimerów.*
- 1998 Grant Z-45/3/98 *Financial support of the scientific exchange related to research of protein kinases* (Polish-Japanese research and technological collaboration).
- 1999 – 01 Kierownik grantu KBN 8 T11F 016 16, *Rozwijanie metod modelowania i ich zastosowania w badaniach układów biomolekularnych.*
- 2000 – 04 Koordynator polskiej części projektu: IST-1999-20247 EUROGRID, *Application Testbed for European GRID Computing.*
- 2002 – 05 Koordynator polskiej części projektu: IST-2001-32257 GRIP, *GRID Interoperability Project.*
- 2002 – 05 Główny wykonawca, grant KBN 4 T11F 009 25, *Rozwijanie symulacyjnych metod kwantowej i kwantowo-klasycznej dynamiki molekularnej oraz zastosowania w badaniach układów atomowych i biomolekularnych.*
- 2002 – 05 Grant QLRI-CT-2002-90383, *European Centre of Excellence for Multiscale Biomolecular Modelling, Bioinformatics and Applications.*
- 2005 Grant inwestycyjny: *Budowa laboratorium projektowania molekularnego oraz zastosowań genomiki i proteomiki w Centrum Doskonałości „BioExploratorium”.*

Aktualna tematyka badawcza:

- modele kwantowej oraz kwantowo-klasycznej dynamiki molekularnej (QCMD) i jej zastosowania w symulacji procesów enzymatycznych,
- „gruboziarnista” klasyczna dynamika molekularna, m.in. w formalizmach Lagrange’a i kwaternionów,
- metody Monte-Carlo,
- metody równania Poissona-Boltzmana (PB) i uogólnionego modelu Borna (GB), m.in. do wyznaczania mezoskopowych pól elektrostatycznych, energii swobodnej układów (bio)molekularnych oraz w zastosowaniu do wirtualnego miareczkowania białek,
- mechanizmy specyficznego rozpoznawania się układów (bio)molekularnych, w szczególności: białek i kwasów nukleinowych oraz ligandów niskocząsteczkowych z białkami, zastosowania w projektowaniu inhibitorów enzymów (potencjalnych leków),
- rozwijanie algorytmów biofizyki molekularnej i bioinformatyki,
- rozwijanie metod nauk obliczeniowych, m.in. algorytmy zrównoleglania i rozproszonego przetwarzania.

Doświadczenie dydaktyczne:

W ciągu 30 lat pracy na UW prowadziłem różnorodne wykłady, pracownie i seminaria z fizyki i biofizyki molekularnej oraz nauk obliczeniowych i modelowania. Ostatnio prowadzone zajęcia dydaktyczne, patrz: <http://www.icm.edu.pl/edukacja/>.

Opieka naukowa:

Opiekun około 22 prac magisterskich.

Promotor 5 prac doktorskich:

- Dr. Piotr Bala,
- Dr. Paweł Grochowski,
- Dr. Witold Rudnicki,
- Dr. Krzysztof Ginalski,
- Dr. Michał Wojciechowski.

Obecnie opiekun 7 doktorantów.

Członek "editorial board":

- Computing and Visualization in Science,
- Molecular Simulation, do roku 2000,
- Częste recenzje dla J.Phys.Chem, J.Chem.Phys., Biophys. J. i innych.

Członkostwo w towarzystwach naukowych:

- Alexander von Humboldt Society
- American Chemical Society
- Polskie Towarzystwo Fizyczne
- International Society for Theoretical Chemical Physics

Członkostwo w ciałach naukowych/edukacyjnych:

- 1993 – 2005, członek Rady Naukowej Instytutu Biochemii i Biofizyki PAN,
- 1985 – 2002, członek Rady Wydziału Fizyki oraz Rady Naukowej IFD, UW
- 1993 – 1998, członek Rady Naukowej Instytutu Chemii Bioorganicznej PAN,
- 1993 – 2005, członek Komitetu Biochemii i Biofizyki Polskiej Akademii Nauk, w latach 1996 - 2002 sekretarz KBB PAN,
- 2000 - 2003, z-ca przewodniczącego Sekcji Uniwersytetów oraz członek Komisji Rozwoju, Rady Głównej Szkolnictwa Wyższego,
- w latach 1995-2003 kilkakrotnie członek jednej z sekcji oraz zespołu ZII KBN lub MNiI,
- 2005 - członek zespołu eksperckiego EC: FP6-Priority 3, "*Nanotechnology and Nanosciences, Knowledge-based Multifunctional Materials*".

Publikacje

w recenzowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym (2000-2005)

(w załączeniu również lista wszystkich prac i komunikatów z lat 1993 – 2005 z uniwersyteckiej bazy danych, w sumie współautor/autor 102 publikacji)

1. W. Rudnicki, G. Bakalarski, B. Lesyng, *A Mesoscopic Model of Nucleic Acids. Part 1. Lagrangian and Quaternion Molecular Dynamics*, J. Biomol. Struct. & Dynamics **17**, 2000, 1097-1108
2. M. Maciejczyk, W. Rudnicki, B. Lesyng, *A Mesoscopic Model of Nucleic Acids. Part 2. An Effective Potential Energy Function for DNA*, J. Biomol. Struct. & Dynamics, **17** 2000, 1109-1115
3. W. Rudnicki, M. Kurzepa, T. Szczepanik, B. Lesyng, *A simple model for predicting the free energy of binding between anthracycline antibiotics and DNA*, Acta Biochim. Polon. **47**, 2000, 1-9
4. P. Bała, P. Grochowski, K. Nowiński, B. Lesyng, J. McCammon, *Quantum-Dynamical Picture of a Multi-Step Enzymatic Process. Reaction Catalyzed by Phospholipase A2*, Biophys. J., **79**, 2000, 1253-1262
5. K. Ginalski, C. Venclovas, B. Lesyng, K. Fidelis, *Structure-based sequence alignment for the beta-trefoil subdomain of the clostridial neurotoxin family provides residue level information about the putative ganglioside binding site*, FEBS Letters, **482** 2000, 119-124
6. J. Antosiewicz, E. Błachut-Okraśńska, T. Grycuk, B. Lesyng *A Correlation Between Protonation Equilibria in Biomolecular Systems and their Shapes: Studies Using a Poisson-Boltzmann Model*, Math. Sciences & Applications, GAKUTO International Series, **14** 2000, 11-17
7. K. Ginalski, P. Grochowski, B. Lesyng, *Quantum-mechanical calculations of the potential energy function for the phosphate transfer in model systems* (2nd International Conference Inhibitors of Protein Kinases, September 9-15, 2001, Warsaw, Poland) Cellular & Molec. Biol. Letters, **6** (2B), 2001, 549-549
8. M. Miller, K. Ginalski, B. Lesyng, N. Nakaigawa, L. Schmidt, B. Zbar, *Structural basis of oncogenic activation caused by point mutations in the kinase domain of the MET proto-oncogene: Modeling studies*. Proteins – Structure, Function and Genetics. **44**, 2001, 32-43
9. P. Brodacki, K. Ginalski, B. Lesyng, *Modelling the 3D structure of protein kinase C gamma and its interaction with specific Inhibitor, chelerythrine* (2nd International Conference on Inhibitors of Protein Kinases, September 9-15, 2001, Warsaw, Poland) Cellular & Molec. Biol. Letters, **6** (2B), 2001, 548-548
10. M. Miller, K. Ginalski, B. Lesyng, N. Nakaigawa, L. Schmidt, B. Zbar, *Onkogenic activation caused by point mutations in the kinase domain of the met proto-oncogene: Molecular modeling studies* (2nd International Conference on Inhibitors of Protein Kinases, September 9-15, 2001, Warsaw, Poland) Cellular & Molec. Biol. Letters **6** (2B), 2001, 550-550
11. M. Wojciechowski, T. Grycuk, J. Antosiewicz, B. Lesyng, *Prediction of protonation states of phosphotyrosine in short peptides and proteins* (2nd International Conference on Inhibitors of Protein Kinases, September 9-15, 2001, Warsaw, Poland) Cell & Molec. Biol. Letters, **6** (2B), 2001, 552-553

12. K. Ginalski, P. Grochowski, B. Lesyng, D. Shugar, *DFT Calculations and Parameterization of the Approximate Valence Bond Method to Describe the Phosphoryl Transfer Reaction in a Model System*, Int. J. Quant. Chem., **90**, 2002, 1129-1139
13. M. Wojciechowski, T. Grycuk, J. Antosiewicz, B. Lesyng, *Prediction of Secondary Ionization of the Phosphate Group in Phosphotyrosine Peptides*, Biophys. J. **84**, 2003, 750-756
14. F. Rakowski, P. Grochowski, B. Lesyng, *SCC DFT-TB Energy Calculations of the Phosphoryl Transfer Reaction in the PKA Active Site* (3rd International Conference on Inhibitors of Protein Kinases, June 23-28, 2003, Warsaw, Poland) Cell & Molec. Biol. Letters, **8** (2A) 2003, 603-604
15. J. Leluk, B. Lesyng, *A comparative study of the primary structures of protein and sugar kinases* (3rd International Conference on Inhibitors of Protein Kinases, June 23-28, 2003, Warsaw, Poland) Cell. & Molec. Biol. Lett., **8**(2A) 2003, 620-621
16. B. Lesyng, P. Bala, D. Erwin, *EUROGRID - European Computational Grid Testbed*, J. of Parallel & Distributed Computing, **63**, 2003, 590-596
17. P. Grochowski, B. Lesyng, *Extended Hellmann-Feynman Forces, Canonical Representations, and Exponential Propagators in the Mixed Quantum-Classical Molecular Dynamics*, J. Chem. Phys., **119**, 2003, 11541-11555
18. J.A. Kalinowski, B. Lesyng, J.D. Thompson, C.J. Cramer, D.G. Truhlar, *Class IV Charge Model for the Self-Consistent Charge Density-Functional Tight-Binding Method*, J. Phys. Chem A, **108**, 2004, 2545-2549
19. L. Walewski, P. Bala, M. Elstner, Th. Frauenheim and B. Lesyng, *Fast QM/MM Method and Its Application to Molecular Systems*, Chem. Phys. Letters, **397**, 2004, 451-458
20. M. Wojciechowski and B. Lesyng, *Generalized Born Model: Analysis, Refinement and Applications to Proteins*, J. Phys. Chem. B, **108**, 2004, 18368-18376
21. L. Walewski, S. Fischer, J. C. Smith, P. Bala, B. Lesyng, *SCC-DFTB Energy Barriers for Single and Double Proton Transfer Processes in Model Molecular Systems*, Int. J. Quant. Chem., **107**, in press
22. A. Gorecki, P. Bala, B. Lesyng, *Parallelization of the Quantum Dynamics Code for Cluster Architecture and its Applications to the Gross-Pitaevskii Equation*, Int. J. Quant. Chem, **107**, in press

Wydawnictwa encyklopedyczne i książkowe (2000-2005)

1. B. Lesyng, K. Nowiński, *Modelowanie w badaniach naukowych*, w „Encyklopedia Multimedialna PWN”, vol. **13**, Nauki przyrodnicze, PWN, Warszawa, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2002
2. B. Lesyng & W. Rudnicki, *Molecular Modelling in Drug Design*, in “Optimization of Aerosol Drug Delivery“, Kluwer, Dordrecht, pp.23-48, 2003

Wykłady na zaproszenie (2000-2005)

(linki do prezentacji niektórych wykładów na stronie
http://www.icm.edu.pl/~lesyng/invited_talks.html)

1. B. Lesyng, *Poisson-Boltzmann and Quantum-Classical Studies of Enzymatic Reactions*, International Conference on Conformation of Peptides, Proteins and Nucleic Acids - Book of Abstracts, Uniwersytet Gdański, 44-44, 2000
2. B. Lesyng, *Rola modelowania w procesie poznawania i rozumienia struktury i dynamiki układów biomolekularnych*, Wykład na Jubileuszowym Zjeździe Naukowym Polskiego Towarzystwa Chemicznego i Stowarzyszenia Inżynierów i Techników Przemysłu Chemicznego, 303-303, PTCH, 2000
3. B. Lesyng, *Fizyka i komputery u progu XXI wieku*, Wykład na Jubileuszowym Zjeździe Polskiego Towarzystwa Fizycznego, Postępy Fizyki, **51**, 12-17, 2000
4. B. Lesyng, *Fast Quantum-Mechanical Generators of the Potential Energy Function for Simulations of Biomolecular and Materials Systems*, Summer School on Parallel Computing in Biomolecular Simulations, Gdansk, 30.08.-1.09.2001
5. B. Lesyng, *Dekada polskiego Internetu w nauce „Rewolucja informacyjna – 10 lat Internetu w Polsce”*, 87-117, Uniwersytet Warszawski, 2002. Wykład wygłoszony na Uniwersytecie Warszawskim z okazji „Dziesięciolecia Polskiego Internetu”, prezentacja, patrz <http://www.internet10.pl/lesyng/start.html>.
6. W latach 2002 - 2005 raz w roku wykład z cyklu: “Complex Processes: Modelling, Simulation and Optimisation”, Polish-German Graduate College, IWR-Heidelberg oraz ICM UW.
7. P. Bala, B. Lesyng, M. Niezgodka, *Grid Solutions at ICM. A Contribution to European Resources and Services*, w “4th Global Village Conference, Conference Proceedings”, wydawnictwo KBN 2003, 161-172 (conference organized by KBN and OECD, Warsaw 10-11 October 2002) – prezentacja wykładu patrz: <http://www.kbn.gov.pl/GRV/abstracts/5-3.pdf>
8. Wojciechowski, T. Grycuk, J. M. Antosiewicz, B. Lesyng, *Simulations of pKa's of Phosphate Groups in Model Systems and Phosphorylated Peptides*, American Chemical Society Meeting, New Orleans, March 23-27, 2003.
9. B. Lesyng, *CM3/SCC-DFTB Charges, Generalized Born and Hydrophobic Models in Description of Hydration Free Energies*, Conference on "Protein Structure Prediction and Protein Folding: Past, Present, and Perspectives", Gdansk, 1-2 Sept., 2004
10. B. Lesyng, *Coupling of SCC-DFTB, Generalized Born and Hydrophobic Models in Description of Hydration Free Energies*, Algorithms for Macromolecular Modeling, University of Leicester, England, Aug. 18-21, 2004.
11. B. Lesyng, *Selected Microscopic and Mesoscopic Modelling Tools and Models - an Overview*, Conference on "Modelling and Design of Molecular Materials", Wrocław, Sept. 16-20, 2004.
12. B. Lesyng, *From Crystallography of Biomolecules to More Detailed Understanding of their Structure and Function*, Symposium on "Crystallography of Biomolecules" to celebrate prof. Alexander Wlodawer as *Doctor Honoris Causa*, Łódź, Oct. 4, 2004
13. B. Lesyng, *Selected Mesoscopic Models for Studying Biomolecular Systems and Materials*, Workshop on “Complex Processes: Modelling, Simulation and Optimisation”, Polish-German Graduate College, Bedlewo, 4-7 Nov., 2004

14. B.Lesyng, *Modelling and Understanding Complex Biomolecular Systems and Processes: Applications in Nanosciences, Biotechnology and Biomedicine*, Conference on "Converging Sciences", Dec.16-17, Trento, Italy, 2004
15. B.Lesyng, (in Polish) *Jak lepiej zrozumieć strukturę i funkcje złożonych układów biomolekularnych ?* Bioinformatics Workshop, SGGW, Warsaw, June 3, 2005
16. B.Lesyng, *Overview of Selected Microscopic and Mesoscopic Biomolecular Modeling Models and Theories or From Physics and Bioinformaticsto Molecular Biology and Biotechnology*, XXXII Winter School, Faculty of Biotechnology, Jagiellonian University, Zakopane, Poland, March, 3-7, 2005