



UNIwersytet
Warszawski



Warszawa, dn. 29.11.2019

**Ocena rozprawy habilitacyjnej i dorobku naukowego
dr inż. Andrzeja Olczaka**

Ocena sporządzona jest w związku ze wszczęciem w dniu 30.06.2019r postępowania habilitacyjnego dr inż. Andrzeja Olczaka i informacją z dnia 10.10.2019r o powołaniu mnie przez Centralną Komisję ds. Stopni i Tytułów Naukowych w skład komisji habilitacyjnej jako recenzenta. Opinia sporządzona jest na podstawie materiałów przygotowanych przez Habilitanta. Na dokumentację składają się wniosek z dnia 29.04.2019 o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego w dziedzinie nauk chemicznych w dyscyplinie chemia, kopia dyplomu doktora nauk chemicznych w zakresie chemii, autoreferat przedstawiający wskazanie osiągnięcia naukowego i opis osiągniętych wyników prac stanowiących jego podstawę (zawierający również dane osobowe, wykaz posiadanych dyplomów oraz informację o dotychczasowym przebiegu zatrudnienia) a także omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych w języku polskim oraz angielskim. Przedstawiony został również wykaz prac stanowiących osiągnięcie naukowe jak również wykazy pozostałych opublikowanych prac naukowych oraz monografii wraz z określeniem zakresu wykonanych prac (w obu przypadkach), dane bibliometryczne, informacje o projektach krajowych i międzynarodowych oraz o nagrodach za działalność naukową i dydaktyczną, wykaz referatów oraz komunikatów posterowych prezentowanych na konferencjach krajowych lub międzynarodowych, udział w konsorcjach naukowych, informacja o osiągnięciach dydaktycznych i popularyzacji nauki jak również aktywności na rzecz środowiska naukowego, informacja o odbytych stażach oraz o sprawowanej opiece naukowej, kopie 9 publikacji wchodzących w skład monotematycznego cyklu prac stanowiącego podstawę do wszczęcia procedury habilitacyjnej, oświadczenia współautorów publikacji wchodzących w monotematyczny cykl będący podstawą do wszczęcia procedury habilitacyjnej jak również dane personalne i kontaktowe.

Dane formalne

Pan dr inż. Andrzej Olczak ukończył studia wyższe na Wydziale Fizyki Technicznej

Prof. dr hab. Michał K. Cyrański
Pasteura 1
02-093 Warszawa
e-mail: mkc@chem.uw.edu.pl
Tel: 22 55 26 360

i Matematyki Stosowanej na Politechnice Łódzkiej. Tutaj w 1987 roku uzyskał on tytuł magistra inżyniera fizyki technicznej broniąc pracę dyplomową pt. „Kinetyka przejścia fazowego z fazy izotropowej do fazy cholesterolowej dla pelargonianu cholesterylu”, która została wykonana pod kierunkiem dr hab. inż. Przemysława Adamskiego. W tym czasie (1986-1989) był on zatrudniony jako pracownik techniczny na Wydziale Fizyki PŁ. Następnie został zatrudniony na Wydziale Chemicznym PŁ, najpierw jako pracownik techniczny (1992-1994) a następnie jako asystent (1994-1997). W 1997r obronił on rozprawę doktorską pt. „Struktura a własności aminokwasowych pochodnych 2,6-ksylidyny, analogów lidokainy” wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Marka Głównki. Od tego czasu zatrudniony jest na Wydziale Chemicznym PŁ jako adiunkt. W latach 1999-2000 odbył staż podoktorski w grupie prof. Johna R. Helliwella w School of Chemistry w University of Manchester w Wielkiej Brytanii. Oprócz tego dobył również dwa staże krótkoterminowe: w University of Manchester (2001) oraz w University of Ioannina (2004).

Ocena dorobku naukowego

Dr inż. Andrzej Olczak opublikował łącznie 56 prac naukowych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym, w zdecydowanej większości notowanych w bazie *Journal Citation Reports*, z określonym współczynnikiem oddziaływania (IF). Wszystkie (poza jedną) stanowią publikacje wieloautorskie. Wszystkie również poza jedną publikacją przeglądową stanowią prace oryginalne. Liczba autorów prac wynosi od 1 do 9, przy czym przeważają prace pięcio- sześciu i siedmioautorskie (35 prac). Szacowany udział waha się w granicach 5-100% (średni wkład wynosi ok. 25%). Jest to wynik raczej typowy dla reprezentowanej przez niego specjalności naukowej. Badacze pracujący w krystalografii często współpracują z naukowcami zajmującymi się syntezą organiczną/nieorganiczną, badaniami fizykochemicznymi (np. spektroskopowymi, kalorymetrycznymi), badaniami teoretycznymi, również aktywnością biologiczną badanych układów. W ten sposób powstają wartościowe prace, dla których nierzadko struktura cząsteczki czy kryształu stanowi podstawę. Zdecydowana większość prac (49) ukazała się po uzyskaniu stopnia doktora, co uważam za wynik bardzo dobry. Pisma, w których ukazały się prace należą najczęściej do specjalistycznych z dziedziny krystalografii takie jak *Acta Crystallographica D* (6 prac), *Acta Crystallographica C* (11 prac), *Acta Crystallographica A* (2 prace), *Journal of Molecular Structure* (6 prac), czy *Journal of Chemical Crystallography* (6 prac). Są to periodyki, które przestrzegają najwyższych standardów publikacyjnych odnośnie jakości prezentowanych danych strukturalnych (w szczególności dotyczy to prac publikowanych w *Acta Crystallographica*). Wśród prac Habilitanta można znaleźć także opublikowane w dobrych/bardzo dobrych czasopismach z chemii (np. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, czy *Tetrahedron Letters*). Sumaryczny *Impact Factor* opublikowanych prac zgodnie z rokiem opublikowania wynosi 110.9, co stanowi średnio ponad 2.3 na pracę. Jest to wynik dobry. Prace Pana dr inż. Andrzeja Olczaka były

cytowane łącznie 559 razy (480 bez autocytowań). Hirscha wynosi $H=11$. W mojej ocenie wskaźniki te są również na dobrym poziomie i świadczą o znaczącym wpływie Jego prac na rozwój chemii. Są to prace o dużym walorze koncepcyjnym/metodologicznym - związane z rozpraszaniem anomalnym i jego konsekwencjami oraz krystalografią makromolekularną (głównie prace będące podstawą osiągnięcia habilitacyjnego) jak również wartościowe publikacje rozwiązujące konkretne zagadnienia strukturalne w szczególności dotyczące związków aktywnych farmaceutycznie takich jak pochodne arylopiperyazyny z długimi łańcuchami (ligandy receptora serotoninowego), pochodne izoniazydu i hydrazyny (aktywność przeciwbakteryjna), pochodne benzoimidazolu (aktywność przeciwbakteryjna oraz przeciwgrzybiczna), czy bispochodne poliamin alifatycznych (aktywność przeciwnowotworowa). Habilitant przedstawiał wyniki swoich badań w formie 6 referatów ustnych (wszystkie po uzyskaniu stopnia doktora) oraz 59 prezentacji posterowych, w zdecydowanej większości na konferencjach krajowych. Wśród nich dominowało Konwersatorium Krystalograficzne - konferencja o uznanej renomie organizowana corocznie przez Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu. Choć Habilitant uczestniczył również w innych konferencjach (najważniejszą była Europejska Konferencja Krystalograficzna) szkoda że było ich tak mało. Jestem pewien, że uczestnictwo takie umożliwiłoby mu nawiązanie liczniejszej współpracy ale również zwiększyło rozpoznawalność Jego badań. Pewnym mankamentem aktywności naukowej jest brak kierownictwa grantów naukowych, choć był/jest wykonawcą 5 projektów w tym trwającego obecnie Opus z Narodowego Centrum Nauki. Za działalność naukową otrzymał nagrodę Dziekana Wydziału Chemicznego Politechniki Łódzkiej (2008), nagrodę Rektora Politechniki Łódzkiej (2009) oraz nagrodę Rektora Uniwersytetu Medycznego w Łodzi (2012). **W podsumowaniu tej części stwierdzam, iż zarówno całkowity dorobek publikacyjny Habilitanta jak i związana z nim aktywność naukowa są na dobrym poziomie. Jego wkład w rozwój nauki jest znaczący.**

Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej

Tytuł osiągnięcia naukowego brzmi: „Rozpraszanie rezonansowe w rentgenografii strukturalnej – wybrane aspekty teoretyczne i aplikacyjne”. Na rozprawę składa się cykl 9 monotematycznych publikacji naukowych opublikowanych w latach 2001-2018. Wszystkie publikacje to prace oryginalne. Były one cytowane 162 razy, przy czym dokładniejsza analiza zasobów danych Web of Science wykonana przez ze mnie ujawniła, iż aż trzy z nich były w tym ujęciu bardzo znaczące: **H2** (33 cytowań), **H6** (39 cytowań) oraz **H1** (58 cytowań). Wszystkie one opublikowane zostały w dobrych/bardzo dobrych specjalistycznych czasopismach naukowych - cztery prace w *Acta Crystallographica D* (**H1**, **H4**, **H5**, **H7** IF=1.4-6.4), dwie w *Acta Crystallographica A* (**H2**, **H8**, IF=1.6-2.1), oraz po jednej pracy w *Journal of Applied Crystallography* (**H3**, IF=3.5), *Archives of Biochemistry and Biophysics*, (**H6**, IF=2.6) i w *Crystallography Reviews* (**H9**, IF=3.1). Wszystkie, poza

jedną (**H8**) prace są wieloautorskie. Liczba współautorów waha się w granicach 1-9, zaś deklarowany udział od 25-100%. Zdecydowanie przeważa on nad średnim wkładem pozostałych autorów. W 6 pracach jest on autorem pierwszym (**H2**, **H5**, **H6**, **H7**, **H8**, **H9**) a w dwóch (**H7**, **H8**) również autorem korespondencyjnym. Wśród oświadczeń współautorów brak jest kilku z nich ze względu na brak kontaktu z autorami. W tych przypadkach w ich imieniu przedstawione zostały jednak odpowiednie wyjaśnienia przez autorów korespondencyjnych prac. Wszystkie oświadczenia są spójne i nie pozostawiają wątpliwości odnośnie udziału Habilitanta.

Rozprawa habilitacyjna Pana dr inż. Andrzeja Olczaka jest poświęcona ważnemu zagadnieniu teoretycznemu z zakresu chemii strukturalnej (w szczególności krystalografii) związanemu z rozpraszaniem anomalnym (rezonansowym) promieniowania rentgenowskiego na kryształach. Najczęściej ten efekt (zjawisko fizyczne) w badaniach eksperymentalnych wykorzystywany jest do określenia struktury absolutnej danego związku chemicznego. Podejście przedstawione w cyklu prac umożliwia określenie budowy układów makromolekularnych w szczególności białek. Krystalografia białkowa jest obecnie niezwykle dynamicznie rozwijającą się dziedziną nauki. Znajomość budowy tych układów jest trudna do przecenienia. Umożliwia m.in. na poziomie molekularnym zrozumienie wielu mechanizmów związanych z funkcjonowaniem żywych organizmów, zachodzących w nich procesów, umożliwia projektowanie nowych układów molekularnych prowadzących do ich inhibicji, katalizy bądź znaczącej modyfikacji. Dokonania habilitanta wpisują się znakomicie w tę nurt badań. W swej pracy przedstawił on szereg aspektów teoretycznych/metodologicznych ale również udało mu się rozwiązać struktury kilku białek, co jest dużym osiągnięciem poznawczym. Z całą pewnością Jego badania stanowią ważny wkład w rozwój nauki. W badaniach Habilitant skupił się na niektórych właściwościach statycznych różnic Bijoveta (są to niezerowe różnice intensywności refleksów ugiętych w eksperymencie dyfrakcji promieni rentgenowskich na monokryształach $I_{hkl} - I_{\bar{h}\bar{k}\bar{l}}$) i ich wykorzystaniu praktycznym. Z punktu widzenia metodologicznego, w mojej ocenie, prace o największym wkładzie koncepcyjnym stanowią publikacje **H2**, **H5**, **H8** oraz **H9**. W pierwszej z nich wyprowadzony został wzór dla sygnału anomalnego w przypadku obecności dwu różnych typów atomów rozpraszających anomalnie. Jest to o tyle istotne, iż w ten sposób można określić wielkość tego parametru jedynie na podstawie samego składu kryształu (bez konieczności znajomości jego struktury), co umożliwia określenie prawdopodobieństwa poprawnego wyznaczenia struktury absolutnej jeszcze przed wykonaniem pomiaru dyfrakcyjnego. Habilitant podaje odnośnik do ogólnodostępnej strony internetowej, gdzie można obliczyć wartość tego parametru. W pracy tej zaproponowano również metodę *s-swat* (*softer single-wavelength anomalous technique*) rozwiązywania struktur makromolekularnych, która jest modyfikacją metod *SIR* (*single isomorphous replacement*) i *SAD* (*single-wavelength anomalous dispersion*). W metodzie tej dla zwiększenia sygnału anomalnego użyto fali o dłuższej długości. Na uwagę zasługuje fakt, iż praca **H2** została zauważona przez Edytora IUCr Newsletter i wyróżniona. Dzięki m.in. takiemu podejściu udało się rozwiązać strukturę białka

Apocrustacyaniny A_1 , co było przedmiotem pracy **H1**. Na podkreślenie zasługuje, iż zaproponowanie modelu tego układu makromolekularnego zostało wykonane w głównej mierze przez Habilitanta. Uważam to za kolejne duże osiągnięcie. Interesującą (i ważną z punktu widzenia metodologicznego) była praca **H3**, gdzie szczegółowo przeanalizowano rolę długości użytego promieniowania oraz sposobu procesowania danych dla określenia struktury tego białka (*Apocrustacyaniny A_1*) oraz *lizozymu*. Kolejne trzy prace **H4**, **H5** i **H7** dotyczą badań strukturalnych białka *Gramicydyny D* w kompleksie z RbCl (praca **H4**), niestechiometrycznym kompleksie z KI (praca **H5**) oraz NaI (praca **H7**), gdzie Habilitant uczestniczył w określeniu budowy tych złożonych układów. W pracy **H5** Habilitant zaproponował użycia parametru Flacka jako swoistego narzędzia diagnostycznego do oceny prawidłowości obsadzenia atomów rozpraszających rezonansowo. Wyprowadził on odpowiedni wzór określający sygnał anomalny właśnie dla układów z częściowym obsadzeniem atomów, co uważam za osiągnięcie bardzo ważne, ponieważ znacząco zwiększa zakres stosowalności narzędzi opartych na zjawisku rozpraszania anomalnego. Dzięki temu podejściu w pracy **H7** Habilitant na podstawie analizy sygnału anomalnego dodatkowo krytycznie przedyskutował niekonsekwencje strukturalne w modelu lewoskrętnej *gramicydyny A* w kompleksie z CsCl. O dużym doświadczeniu Habilitanta związanym krystalografią makromolekularną świadczy praca **H6**, w której rozwiązał on w całości i następnie udokładnił model białka β -D-ksylozydazy/ α -L-arabinofuranozydazy. Uważam to za kolejne ważne osiągnięcie naukowe, biorąc pod uwagę wielkość badanego układu (2152 aminokwasów). Praca **H8** jest komentarzem polemicznym do opublikowanej wcześniej publikacji U. Shmueli i H.D. Flacka (*Acta Crystallographica A* 2010). W pracy tej dr inż. Andrzej Olczak wykazuje, iż wyprowadzenia rozkładów prawdopodobieństwa w komentowanej pracy opierają się na błędnych założeniach metodologicznych. To konstruktywna polemika, ponieważ przedstawia jednocześnie założenia do przeprowadzenia odpowiednich rozumowań i symulacji dla wyprowadzenia rozkładu dla podanej przez autorów struktury testowej a jednocześnie wskazuje możliwości wykorzystania odpowiednich rozkładów w badaniach strukturalnych. Ta monoautorska praca wskazuje na dojrzałość autora. Należy w tym miejscu nadmienić, iż prof. Flack jest uznanym autorytetem w dziedzinie, a jego model (znany w literaturze jako *parametr Flacka*) jest powszechnie, standardowo stosowanym wskaźnikiem poprawnego wyznaczenia struktury absolutnej. W pewnym sensie kontynuacją tej pracy (ale także i innych) jest praca **H9**, która poświęcona jest wyprowadzeniu zależności łączącej sygnał anomalny z odpowiednimi parametrami opisującymi jakość pomiaru dyfrakcyjnego. To podejście umożliwiło analizę statystyczną wybranych danych pomiarowych ponad stu układów rozwiązanych metodą SAD i jest pomocne w określeniu prawdopodobieństwa określenia faz struktury układów makromolekularnych. Reasumując: **Nie mam wątpliwości, iż problemy podjęte przez dr inż. Andrzeja Olczaka są ważne, zaś przedstawione przez niego prace stanowią znaczący wkład w rozwój krystalografii a w szerszym ujęciu chemii strukturalnej.**

Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej

Doświadczenie dydaktyczne Habilitanta jest zróżnicowane. Oprócz zajęć z Krystalografii czy Analizy Rentgenowskiej Monokryształu (wykłady, ćwiczenia i laboratorium), prowadził on również wykłady z Fizyki, laboratorium z Podstaw Technologii, wykład i ćwiczenia z Meteorologii i Klimatologii, laboratorium z Chemii Bionieorganicznej, laboratorium z Chemii Technicznej a także nadzorował projekt z przedmiotu „Struktura i Powierzchnia Nanomateriałów”. Dodatkowo opracował karty przedmiotów: „Krystalografia” i „Meteorologia i Klimatologia”, był również kierownikiem tego przedmiotu. Wymienione powyżej zajęcia prowadził na różnych stopniach studiów oraz na różnych wydziałach Politechniki Łódzkiej. Ponadto był również promotorem 7 prac magisterskich i 11 prac inżynierskich, recenzentem 5 prac inżynierskich a obecnie pełni funkcję promotora pomocniczego w dwóch przewodach doktorskich. Dwukrotnie sprawował również opiekę nad stażem naukowym studentów z jednostek zewnętrznych (z Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego oraz Uniwersytetu Pedagogicznego w Krakowie). Na uznanie zasługuje jego znacząca aktywność organizacyjna. W roku akademickim 2007/2008 był członkiem Wydziałowej Komisji Rekrutacyjnej Wydziału Chemicznego Politechniki Łódzkiej. Od 2016 roku jest członkiem Komitetu Organizacyjnego Ogólnopolskiej Olimpiady Krystalograficznej. Wcześniej, w 2014 roku sprawował opiekę nad wyróżnioną drużyną I Ogólnopolskiej Olimpiady Krystalograficznej, zaś w 2016 roku nad indywidualnym zwycięzcą II Ogólnopolskiej Olimpiady Krystalograficznej. Ponadto w latach 201-2017 był odpowiedzialny za przygotowanie i przedstawienie wydarzenia festiwalowego na Festiwalu Nauki, Techniki i Sztuki. Od 2013 roku jest członkiem Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego. Podsumowując tę część aktywności uważam, że zarówno działalność dydaktyczna jak i organizacyjna są na dobrym poziomie.

Konkluzja

Prace będące podstawą przewodu habilitacyjnego stanowią cykl monotematyczny. Wnoszą one istotny wkład w chemię strukturalną układów makromolekularnych. Stwierdzam, iż dorobek naukowy, organizacyjny i dydaktyczny oraz rozprawa habilitacyjna spełnia wymagania ustawy o tytule naukowym i stopniach naukowych oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003r (Dz. U. z 2016r poz. 882 ze zm. w Dz. U. z 2016r. poz. 1311) i wnioskuję do odpowiedniej Rady Naukowej Politechniki Łódzkiej o nadanie dr inż. Andrzejowi Olczakowi stopnia naukowego doktora habilitowanego nauk chemicznych.



Michał K. Cyrański