



Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN
im. Włodzimierza Trzebiatowskiego
we Wrocławiu

Adres Instytutu: ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław
Tel. 71 3435021
REGON: 0326109

Adres pocztowy: P Nr 1410, 50-950 Wrocław 2
Fax: 71 3441029
Konto: BGK 74 1130 1033 0018 8183 0720 0002

E-mail: intibs@int.pan.wroc.pl
Website: <http://www.int.pan.wroc.pl>
NIP: 896-00-07-258

Prof. dr hab. Marek Wołczyr
Oddział Badań Strukturalnych
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN
Wrocław

Wrocław, 29 listopada 2019 r.

OCENA
osiągnięcia naukowego
pt. „Rozpraszanie rezonansowe w rentgenografii strukturalnej – wybrane
aspekty teoretyczne i aplikacyjne” oraz całokształtu dorobku naukowego
dr. Andrzeja Olczaka
w związku z postępowaniem o nadanie stopnia doktora habilitowanego

Dr Andrzej Olczak jest absolwentem Wydziału Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Łódzkiej, na którym w roku 1987 uzyskał tytuł magistra inżyniera fizyki technicznej. W roku 1997, na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej, obronił pracę doktorską pt. „Kinetyka przejścia fazowego z fazy izotropowej do fazy cholesterolowej dla pelargonianu cholesterylu”, wykonaną pod kierunkiem prof. dr hab. inż. Marka Głównki. Od 1992 roku jest zatrudniony na Wydziale Chemicznym Politechniki Łódzkiej, najpierw na stanowisku pracownika technicznego, potem asystenta, a od 1997 roku do dziś – na stanowisku adiunkta.

1. Ocena osiągnięcia naukowego pt. „Rozpraszanie rezonansowe w rentgenografii strukturalnej – wybrane aspekty teoretyczne i aplikacyjne”

W ramach postępowania habilitacyjnego dr Andrzej Olczak przedstawił cykl 9 powiązanych tematycznie publikacji, które ukazały się w latach 2001 – 2018 w *Acta Crystallographica D* (4 prace), *Acta Crystallographica A* (2 prace), *Journal of Applied Crystallography* (1 praca), *Crystallography Reviews* (1 praca) – czyli w kluczowych periodykach publikujących wyniki badań krystalograficznych – oraz w wysoko punktowanym czasopiśmie *Archives of Biochemistry and Biophysics*. Są to wszystko bardzo dobre czasopisma anglojęzyczne o obiegu międzynarodowym. Publikacje te, o średnim *impact factorze* 2.64, były cytowane do tej pory przynajmniej 162 razy. Prace (za wyjątkiem jednej) są wieloautorskie, ale Habilitant jest pierwszym autorem w 5 z nich. Szacuje swój udział w przedstawionych do oceny pracach (w porozumieniu ze współautorami) od 25 do 100%.

Habilitant przygotował bardzo dobrze i interesująco napisany 28-stronicowy autoreferat, w którym zgrabnie połączył nicią przewodnią 9 publikacji powstałych na przestrzeni 17 lat. Autoreferat zawiera 48 odnośników literaturowych.

Tematyka prac wchodzących w skład habilitacji dotyczy zastosowania anomalnego rozpraszania promieniowania rentgenowskiego w analizie strukturalnej kryształów ze szczególnym uwzględnieniem struktur makromolekularnych. Znajdujemy tu zarówno prace metodyczne, których celem jest optymalizacja metod rozwiązywania struktury poprzez poznanie i umiejętne wykorzystanie rozkładu różnic Bijvoeta, jak i prace eksperymentalne poświęcone zastosowaniom uzyskanych wyników w procesie rozwiązywania struktur makromolekularnych. Wśród załączonych prac znajduje się także jedna obszerna praca przeglądowa na temat stosunku sygnału do szumu w eksperymentach SAD dla struktur makromolekularnych oparta na analizie 115 struktur z bazy PDB oraz śmiała polemika z tuzami światowej krytalografii na temat rozkładów statystycznych średnich wartości i różnic intensywności par Friedla.

Tematyka badawcza stanowiąca przedmiot rozprawy pojawiła się w pracach Habilitanta w roku 2000, podczas stażu na Uniwersytecie w Manchesterze w grupie prof. Johna Helliwella, w trakcie pracy nad rozwiązaniem struktury apokrustacyjaniny A_1 opisanej w pracy **H1**. Wykorzystano wtedy 4 zbiory danych strukturalnych zebranych na synchrotronie przy różnych długościach fali i w różnym reżimie pomiarowym, w tym dla struktury pochodnej z podstawieniem ksenonowym. Dzięki metodzie SIROAS (*Single Isomorphous Replacement with Optimised Anomalous Scattering*), nad którą grupa prof. Helliwella pracowała już wcześniej, udało się rozwiązać złożoną strukturę białka, a doświadczenia Habilitanta skłoniły go do podjęcia tematyki związanej z rozpraszaniem rezonansowym.

Kolejną pracą Habilitanta w Manchesterze (**H2**) było rozwinięcie metody zastosowanej w pracy **H1** i sformułowanie procedury S-SWAT, czyli *Softer Single-Wavelength Anomalous Technique*, polegającej na takim doborze długości fali promieniowania rentgenowskiego, by zoptymalizować udział anomalnego rozpraszania atomów ksenonu i siarki. Habilitant sformułował teoretyczne podstawy metody wyprowadzając zależności analityczne opisujące wkład rozpraszania anomalnego ksenonu przy obecności również anomalnie rozpraszającej siarki. Dzięki temu, udało się mniejszym nakładem pracy rozwiązać strukturę apokrustacyjaniny A_1 z pracy **H1**. Procedura S-SWAT stanowiła propozycję wydajnej procedury pomiarowej dla struktur makromolekularnych i była z biegiem czasu dość często cytowana.

Trzecia z manchesterskich prac Habilitanta (**H3**) stawia pytania o warunki pomiaru dyfrakcyjnego białek średniej wielkości. Habilitant wraz ze współautorami pokazuje, że możliwe są efektywne pomiary synchrotronowe lub przy pomocy źródła z rotującą anodą w temperaturze pokojowej, by uzyskać istotny anomalny sygnał pochodzący od atomów siarki. Autorzy testują swoje podejście na dwóch strukturach: lizozymie z białka kurzego i apokrustacyjaninie A_1 .

Kolejne 3 prace Habilitanta (**H4**, **H5** i **H7**) wykonane zostały w grupie prof. Marka Głównki na Politechnice Łódzkiej we współpracy z grupą prof. Williama Duaxa z Buffalo i są pracami strukturalnymi poświęconymi rozwiązaniu struktur trzech kompleksów gramicydyny D: z $RbCl$, KI oraz NaI . Wysoka rozdzielczość i dobra jakość danych umożliwiła przybliżone ustalenie proporcji różnych odmian gramicydyny: A, B i C. Możliwe było udokładnienie reszt nieuporządkowanych. Największe wyzwanie stanowiło udokładnienie wnętrza kanału

gramicydynowego. Do lokalizacji jonów K^+ , Na^+ oraz Rb^+ , użyto map rozpraszania anomalnego opartych na różnicach Bijvoeta i odpowiednio zmodyfikowanych obliczonych fazach. Wykonanie dodatkowych pomiarów dla większych długości fal (1.466 i 1.77 Å) dla kompleksu gramicydyny z KI nie przyniosło dodatkowej informacji o położeniu kationów potasu. Wynika to najprawdopodobniej z dominującej roli jodu w rozpraszaniu anomalnym, które wzrasta wraz z długością fali proporcjonalnie do wkładu pochodzącego od potasu.

Czwartą pracą czysto strukturalną Habilitanta, wykonaną tym razem we współpracy z badaczami z Illinois, jest praca **H6** poświęcona rozwiązaniu struktury białka β -D-ksylozydazy. Ze względu na rozmiar tego białka (4×538 aminokwasów) jego rozwiązanie było dużym wyzwaniem. Eksperyment dyfrakcyjny dla białka natywnego oraz eksperyment MAD dla pochodnej selenometioninowej został wykonany na synchrotronie APS w Argonne. W toku rozwiązywania struktury użyto m.in. danych anomalnego rozpraszania atomów selenu. W rezultacie, badane białko okazało się tetramerem o symetrii punktowej 222, którego struktura została udokładniona na danych o rozdzielczości 1.8 Å.

Skromnie wyglądająca, krótka i będąca właściwie komentarzem praca **H8** jest dowodem wielkiej odwagi naukowej Habilitanta. Zawarł w niej dr Olczak krytykę pracy dwóch bardzo znanych krystalografów, Uri Shmueliego z Tel Avivu i Howarda Flacka z Genevy, z 2010 roku (dalej w skrócie S&F), dotyczącej rozkładów prawdopodobieństwa średnich i różnic intensywności występujących w parach friedlowskich w grupie przestrzennej $P1$. Habilitant zarzucił autorom przyjęcie błędnego założenia o równomiernym rozkładzie prawdopodobieństwa odległości międzyatomowych w komórce elementarnej kryształu, podczas gdy właściwe jest założenie o takim rozkładzie dla pozycji atomowych. Zdaniem Habilitanta otrzymane przez S&F formuły są błędne i nie opisują realnych kryształów. S&F dość zdawkowo odpowiedzieli na komentarz Habilitanta pozostając twarde na swoich pozycjach.

W ramach niniejszej recenzji nie jestem w stanie rozsądzić sporu, ale pozwolę sobie zwrócić uwagę na kilka argumentów obu stron. Habilitant zwraca uwagę, że formuły S&F nie są kompatybilne z wcześniejszymi, mniej ogólnymi wynikami Parthasarathy i Srinivasana, a uzyskane przy użyciu ich formuł rozkłady są inne niż zaprezentowane przez S&F, i pokrywają się z obliczeniami Habilitanta dla fikcyjnego, modelowego kryształu, na którym testowali swoje formuły S&F. Habilitant twierdzi, że test przeprowadzony przez S&F nie jest wiarygodny, bo także i testowy kryształ został zbudowany w oparciu o błędne założenie. To rozsądne wyjaśnienie. Z drugiej jednak strony, Habilitant nie odnosi się do drugiego testu przeprowadzonego przez S&F na realnym kryształcie wyjętym z bazy CSD, który daje wyniki zgodne z formułami S&F. Shmueli i Flack piszą w swojej odpowiedzi zadziwiająco – jak na teoretyków – pragmatycznie, że poprawność założeń weryfikowana jest przez przydatność w interpretacji eksperymentów. A może to oni mają rację i dla oceny efektów dyfrakcyjnych ważny jest równomierny rozkład prawdopodobieństwa pozycji zajmowanych nie przez atomy w komórce elementarnej, lecz przez piki w komórce pattersonowskiej? Moje uwagi nie umniejszają jednak pozytywnej oceny próby naukowej polemiki Habilitanta z „przeciwnikami wagi ciężkiej” jakimi niewątpliwie są profesorowie Shmueli i Flack.

Przeglądowa praca **H9** napisana 8 lat po przedostatniej w cyklu pracy **H8** skłoniła z pewnością Habilitanta do zamknięcia cyklu i wszczęcia procedury habilitacyjnej. W pracy zaprezentowano model matematyczny umożliwiający oszacowanie jakości eksperymentu dyfrakcyjnego niezbędnej do pomyślnego fazowania SAD i zweryfikowano go na podstawie danych z 115 udanych natywnych eksperymentów SAD dostępnych w PDB. Model pozwala

z góry przewidzieć wartość całkowitego $\langle I/\sigma(I) \rangle$ niezbędną do pomyślnego fazowania SAD, biorąc pod uwagę parametry badanej struktury. Przedstawione wyniki mają ogólne zastosowanie do każdego fazowania obejmującego pomiar anomalnego sygnału od dowolnego anomalnie rozpraszającego atomu i dowolnego źródła promieniowania rentgenowskiego, w tym XFEL.

Podsumowując: cykl 9 prac wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej dr. Andrzeja Olczaka to krystalograficzne prace strukturalne na najwyższym światowym poziomie, wykonane w najlepszych ośrodkach krystalograficznych na świecie (wliczając w to macierzysty ośrodek Habilitanta: Wydział Chemiczny Politechniki Łódzkiej) i w międzynarodowej współpracy naukowej z wieloma znakomitymi badaczami. Na uwagę zasługuje naukowy namysł Habilitanta nad stosowanymi metodami eksperymentalnymi i stosowanymi procedurami numerycznymi prowadzącymi do finalnych wyników, który pozwolił mu na sformułowanie kilku nowych sposobów podejścia do wykorzystania rozpraszania rezonansowego w analizie strukturalnej makromolekuł. Tak więc, **cykl 9 prac wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej dr. Andrzeja Olczaka stanowi znaczny wkład w rozwój nauk chemicznych, a w szczególności w rozwój rentgenowskiej analizy strukturalnej i wiedzy o nowych strukturach makromolekularnych.**

2. Ocena istotnej aktywności naukowej Habilitanta

Dorobek naukowy dr Andrzeja Olczaka obejmuje 55 publikacji w bardzo dobrych czasopismach z listy JCR (w tym 9 wchodzących w skład habilitacji). 48 z tych publikacji Habilitant opublikował po uzyskaniu stopnia doktora. Prace dotyczą analizy strukturalnej różnorodnych związków organicznych, w tym farmaceutyków i struktur makromolekularnych. Warto tu dodać informację, której Habilitant nie podaje w swoich materiałach, a która świadczy o jego dużej aktywności jako krystalografa. Dwie ważne krystalograficzne bazy danych zawierają liczne struktury oznaczone przez Habilitanta: *Cambridge Structural Database* – 97 wpisów, zaś *Protein Data Base* – 6 wpisów.

Prace Habilitanta cytowane były do chwili obecnej co najmniej 559 razy (bez autocytowań 480 razy), a jego indeks Hirscha wynosi 12.

Na wystąpienia konferencyjne Habilitanta składa się 8 referatów wygłoszone przez niego na konferencjach krajowych, 2 plakaty prezentowane osobiście na konferencjach zagranicznych oraz 59 plakatów na konferencjach krajowych. Dr Olczak dał się poznać całemu polskiemu środowisku krystalograficznemu jako niezwykle aktywny i świetnie merytorycznie przygotowany uczestnik Konwersatoriów Krystalograficznych we Wrocławiu, na których prezentował nie tylko komunikaty ze swoich badań, ale często brał udział w warsztatach i sesjach dyskusyjnych.

Habilitant nie kierował międzynarodowymi ani krajowymi projektami badawczymi. Był za to wykonawcą w 4 projektach KBN/NCN w latach 2004 – 2014. Obecnie bierze udział w konsorcjum NCN-OPUS jako wykonawca.

Podsumowując: publikacyjny dorobek Habilitanta jest znaczny. Zarówno ilościowo jak i – zwłaszcza – jakościowo spełnia wymagania stawiane kandydatom w postępowaniu habilitacyjnym. Niedosyt może budzić niewielka liczba referatów na konferencjach międzynarodowych i brak uzyskanych grantów NCN bądź NCBiR,

3. Dorobek dydaktyczny, popularyzatorski i organizacyjny Habilitanta; współpraca międzynarodowa

Dr Andrzej Olczak aktywnie uczestniczy w procesie dydaktycznym na swojej macierzystej uczelni. Jest kierownikiem przedmiotu krystalografia i prowadzi, bądź prowadził, liczne wykłady, ćwiczenia i laboratoria, m.in. z fizyki, krystalografii, meteorologii i klimatologii, analizy rentgenowskiej monokryształów i inne.

Habilitant był promotorem 7 prac magisterskich i 11 prac licencjackich. Był promotorem pomocniczym w dwóch przewodach doktorskich. Opiekował się studentami biorącymi udział w Ogólnopolskich Olimpiadach Krystalograficznych doprowadzając ich do znaczących sukcesów. Przygotowywał wydarzenia Festiwalu Nauki, Techniki i Sztuki w Łodzi i brał w nich czynny udział w latach 2015–17. W kadencji 2016–19 został powołany do Komisji ds. Olimpiady Krystalograficznej działającej w ramach Komitetu Krystalografii PAN.

Habilitant odbył dwuletni staż podoktorski w bardzo dobrej grupie prof. Johna Helliwella na Uniwersytecie w Manchesterze (1999 – 2000), dokąd powrócił na krótko 2001 roku. Odwiedził również Uniwersytet w Ioanninie w lipcu 2004 r.

Warto zaznaczyć, że praca Habilitanta spotkała się z uznaniem macierzystej uczelni, co zaowocowało nagrodą Dziekana Wydziału Chemicznego PŁ za działalność dydaktyczną.

Podsumowując: Habilitant legitymuje się bogatym dorobkiem dydaktycznym i popularyzatorskim. Jest doświadczonym nauczycielem akademickim. Ma za sobą długo-terminowy staż podoktorski, który zaowocował licznymi naukowymi kontaktami międzynarodowymi, co znalazło odbicie w dorobku publikacyjnym Habilitanta.

4. Konkluzja

Na podstawie oceny przedstawionego w ramach habilitacji przez dr. Andrzeja Olczaka cyklu 9 powiązanych tematycznie publikacji pod wspólnym tytułem „Rozpraszanie rezonansowe w rentgenografii strukturalnej – wybrane aspekty teoretyczne i aplikacyjne” oraz całości kształtu jego dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego **uważam, że wszystkie te komponenty spełniają warunki określone w Ustawie z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach i tytule naukowym oraz w Rozporządzenie Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 26 września 2016 r. w sprawie szczegółowego trybu i warunków przeprowadzania czynności w przewodzie doktorskim, w postępowaniu habilitacyjnym oraz w postępowaniu o nadanie tytułu profesora i wnoszę do Wysokiej Komisji, a poprzez nią do Rady Wydziału Chemicznego Politechniki Łódzkiej, o przyznanie dr. Andrzejowi Olczakowi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki chemiczne.**