



**Prof. dr hab. Jolanta Borucka-Bukowska**

**Wydział Chemii**

**Uniwersytet Warszawski**

**ul. L. Pasteura 1, 02093 Warszawa**

Warszawa 12.10.2016

**Ocena rozprawy habilitacyjnej pt. „Rzadkie i prawie-rzadkie reprezentacje w problemach spektroskopii NMR” oraz dorobku naukowego i dydaktycznego**

**dr Krzysztofa Kazimierczuka**

Podstawą niniejszej oceny są przedłożone przez dr Krzysztofa Kazimierczuka dokumenty, zebrane w formie elektronicznej na nośniku CD, na które składają się: podstawowe informacje o drodze zawodowej kandydata, spis publikacji stanowiących podstawę rozprawy habilitacyjnej wraz z danymi scjentometrycznymi, obszerny autoreferat zawierający szczegółowy opis badań zawartych w tych pracach, wykaz pozostałych osiągnięć naukowych (lista wszystkich publikacji i wystąpień konferencyjnych, lista zajęć dydaktycznych, prowadzonych grantów, prac popularyzujących naukę oraz uzyskanych nagród i wyróżnień). Ponadto przedstawione są odbitki wszystkich prac stanowiących podstawę rozprawy habilitacyjnej, a także oświadczenia współautorów o ich wkładzie do tych publikacji. Przedstawiona dokumentacja jest kompletna i wystarczająca do prawidłowej oceny dorobku Habilitanta.

**Sylwetka Habilitanta**

Dr Krzysztof Kazimierczuk jest absolwentem Wydziału Chemii (praca magisterska obroniona w 2005 roku) oraz Wydziału Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego (praca magisterska obroniona w 2007 roku). Już wtedy ukształtowały się zainteresowania naukowe Habilitanta, bowiem obydwie prace magisterskie dotyczyły zagadnień związanych z metodologią pomiarów i przetwarzania sygnałów w spektroskopii jądrowego rezonansu magnetycznego. Studia doktoranckie podjęte przez dr Kazimierczuka po ukończeniu studiów na Wydziale Chemii zostały zwieńczone obroną pracy doktorskiej w 2009, poświęconej metodom szybkiej spektroskopii NMR w badaniach strukturalnych. Istotnym osiągnięciem tej pracy było opracowanie wielowymiarowych technik wykorzystujących losowe próbkowanie sygnału, które przyspieszają czasochłonne i przez to kosztowne eksperymenty NMR i zastosowanie ich do wyznaczania wartości małych stałych sprzężenia w widmach białek. Osiągnięcia pracy doktorskiej dr Kazimierczuka zostały wysoko

ocenione przez recenzentów, rozprawa doktorska została wyróżniona przez Radę Wydziału Chemii UW, następnie nagrodzona nagrodą im Kołosa, a później także przez Prezesa Rady Ministrów. Godne podkreślenia jest przyznanie mu w 2014 roku nagrody im. Świątosławskiego II st. przez Polskie Towarzystwo Chemiczne. Dr Krzysztof Kazimierzczuk po uzyskaniu stopnia doktora nauk został zatrudniony na Wydziale Chemii UW na stanowisku adiunkta, gdzie pracował w zespole prof. Wiktora Koźmińskiego do listopada 2012 (w tym okresie odbył także staż podoktorski). Następnie, kilka miesięcy po powrocie z Szwecji, przeniósł się do nowo powstałej jednostki naukowej Uniwersytetu Warszawskiego – Centrum Nowych Technologii, gdzie zorganizował od podstaw laboratorium NMR, którym kieruje do chwili obecnej.

### **Ocena osiągnięcia habilitacyjnego**

Sukcesy odniesione w pracy doktorskiej z pewnością silnie zmotywowały dr Kazimierzczuka do poszukiwania dalszych rozwiązań metodologicznych w dziedzinie spektroskopii NMR. Prace, które stanowią podstawę habilitacji zostały zapoczątkowane w czasie rocznego stażu podoktorskiego Habilitanta w zespole prof. Vladislava Orekhova w Szwedzkim Centrum NMR w Göteborgu, a później rozwijane były intensywnie w kraju. Na rozprawę habilitacyjną dr Krzysztofa Kazimierzczuka składa się cykl 14 publikacji poświęconych problemom rzadkich i prawie rzadkich reprezentacji w spektroskopii NMR. Prace te opublikowano w stosunkowo krótkim okresie 4 lat (2011 – 2016). Prace stanowiące podstawę habilitacji dr Kazimierzczuka zostały opublikowane w czasopiśmie bardzo wysokiej i wysokiej rangi międzynarodowej: *Angewandte Chemie* (2 prace), *Analytical Chemistry* (2 prace), *Analyst* (2 prace), *Chemical Communications* (1 praca), *ChemPhysChem* (1 praca), *Journal of Biomolecular NMR* (1 praca), *Journal of Magnetic Resonance* (2 prace), *Sensors* (1 praca) i *Magnetic Resonance in Chemistry* (1 praca). Jedną publikacją to opublikowane materiały konferencyjne. Wszystkie prace włączone do habilitacji są wieloautorskie. Dr Kazimierzczuk określił jednak procentowy udział w każdej publikacji, a także jasno opisał charakter swojego wkładu do każdej z prac. Swój udział Habilitant określił na 80% w 1 pracy, 70% w 2 pracach i 60% w 1 pracy, na 50% w 3 pracach, na 40% w 3 pracach, na 30-35 % w 3 pracach i na 10% w 1 pracy. Zatem należy uznać, że w co najmniej połowie prac Jego rola była dominująca. Ocenę udziału dr Kazimierzczuka w omawianych publikacjach ułatwia informacja o tym, że w 10 pracach Habilitant opracował pełną lub częściową koncepcję badań, a więc był ich pomysłodawcą a nie tylko współwykonawcą. Dr Krzysztof Kazimierzczuk w przeważającej większości prac (11 z 14) pełni rolę autora korespondującego. Wśród przedłożonych

dokumentów są także oświadczenia współautorów informujące o ich wkładzie do poszczególnych prac, które dobrze korespondują z informacjami Habilitanta co do swej własnej roli w badaniach włączonych do habilitacji. Analiza tych oświadczeń pozwala na stwierdzenie, że dr Kazimierzczuk z pewnością pełnił wiodącą rolę w badaniach przedstawionych jako osiągnięcie habilitacyjne.

Jądrowy rezonans magnetyczny stanowi współcześnie jedno z najważniejszych narzędzi spektroskopowych służących określaniu struktury białek, której poznanie służy zrozumieniu ich aktywności biologicznej. To decyduje o randze badań prowadzonych od kilku lat przez dr Krzysztofa Kazimierzczuka, których celem jest doskonalenie zalet i niwelowanie ograniczeń tego wspaniałego narzędzia badawczego jakim jest NMR. Największym problemem w wielowymiarowych technikach NMR stosowanych w strukturalnych badaniach białek jest bardzo długi czas pomiarów tych widm, wynikający z małej czułości metody, oraz istnienia relacji między rozdzielczością widma a czasem akwizycji sygnału NMR. Pokonaniu tych ograniczeń poświęcony był zarówno doktorat Habilitanta jak i Jego rozprawa habilitacyjna.

W cyklu prac stanowiących osiągnięcie habilitacyjne dr Kazimierzczuk zajął się wykorzystaniem do przetwarzania danych z widm NMR metodologii, stosowanej wcześniej w innych dziedzinach, takich jak fotografia cyfrowa, nazywanej skompresowanym próbkowaniem (CS – compressed sensing). Stosowana w omawianym cyklu prac metodologia CS wykorzystuje ponadto tzw. niejednorodne (losowe) próbkowanie sygnału (NUS – non-uniform sampling). Na pierwszym etapie badań, prowadzonych jeszcze w czasie stażu podoktorskiego w Szwecji, należało przede wszystkim sprawdzić czy metodologia CS daje się wykorzystać do rekonstrukcji widm NMR, czyli czy prowadzi do odtworzenia poprawnych widm NMR, które nie są idealnie kompresowalne (ściśle rzadkie). Weryfikacji proponowanego podejścia (CS-NUS) dokonano z pomocą kilku metod dwuwymiarowych widm ubikwityny i azuryny. Uzyskane wyniki, opublikowane w prestiżowym *Angewandte Chemie*, były bardzo zachęcające i zmotywowały autora do dalszych wysiłków w kierunku optymalizacji stosowanych algorytmów. Późniejsze prace poświęcono dostosowaniu różnych wariantów algorytmów CS do widm NMR, tak aby dawały one jak najlepiej odtworzone widma, przez wzmocnienie rzadkości widma, dopasowanie gęstości próbkowania do relaksacji sygnału i wykorzystanie faktu, że kształt linii widmowych opisany jest funkcją Lorenza (algorytm LPMP – Lorenzian Peak Matching Pursuit). Współpraca z eksperymentatorami posłużyła Habilitantowi do zweryfikowania skuteczności stosowanych

algorytmów CS i wskazała, że możliwe jest znaczne (kilkukrotne) skrócenie czasu pomiarów wielowymiarowych widm NMR.

Innym interesującym i ambitnym celem prac dr Kazimierczuka było wykorzystanie metodologii CS w eksperymentach dyfuzyjnych, wykorzystywanych nie tylko do wyznaczania współczynników dyfuzji, ale także (a może przede wszystkim) do rozdzielania nakładających się widm mieszanin związków chemicznych na widma składowe. Te zagadnienia są przede wszystkim przedmiotem pracy doktorskiej mgr Mateusza Urbańczyka (przewidywana obrona w 2016 roku), której dr Kazimierczuk jest promotorem pomocniczym. Weryfikacja doświadczalna proponowanych przez Habilitanta algorytmów przyniosła sukcesy w postaci m.in. dokładnego odtworzenia współczynników dyfuzji dla wzorcowych mieszanin metabolitów i otworzyła wyraźne perspektywy do wykorzystania stosowanej metodologii w pomiarach relaksacji białek. Bardzo interesujące wyniki uzyskał Habilitant we współpracy z firmą Bruker Biospin, przedstawiając potencjał swojej metody w badaniach termicznego procesu rozwijania białka. Stosowana tu metodologia (rozdzielczy w czasie CS) sprawdziła się także w przypadku monitorowania przebiegu reakcji w układach wieloskładnikowych. To także kierunek badań z dużymi perspektywami na przyszłość. Prace w tej dziedzinie będą dalej rozwijane przez dr Kazimierczuka w ramach grantu OPUS 9 pt. „Czasorozdzielcza N-wymiarowa spektroskopia do monitorowania procesów fizycznych i chemicznych”, przyznanego Habilitantowi przez NCN na lata 2016-2018.

Opisane pokrótce osiągnięcia zebrane w pracy habilitacyjnej dr Kazimierczuka, stanowią nie tylko istotną nowość naukową, ale przede wszystkim mają ogromne znaczenie praktyczne. Algorytmy opracowane przez Habilitanta zostały już zaimplementowane w oprogramowaniu obsługującym spektrometry NMR, które są sprzedawane przez wiodącego na świecie producenta tej aparatury, firmę Bruker. Wiele laboratoriów naukowych wykorzystuje je do przetwarzania danych NMR w badaniach strukturalnych białek. Dr Krzysztof Kazimierczuk niezależnie od współpracy z firmą Bruker stworzył spółkę typu spin-off z udziałem Uniwersytetu Warszawskiego (Spektrino Sp. z o.o.), której zadaniem jest komercjalizacja opracowywanych algorytmów. Jest to piękny przykład bezpośredniego wykorzystania wyników prac naukowych w praktyce.

Podsumowując tę część mojej opinii chciałam podkreślić, że praca habilitacyjna dr Krzysztofa Kazimierczuka jest wzorem jasnego w założeniach i konsekwentnie realizowanego projektu badawczego, opartego na ciekawych i nowatorskich pomysłach, inspirowanych ideami

pochodzącymi z czasem dość odległych od przedmiotu prac dziedzin. Przedstawiony jako osiągnięcie habilitacyjne zbiór 14 publikacji zawiera szereg ważnych wyników związanych z opracowaniem efektywnych algorytmów, które służą do rekonstrukcji widm NMR z niepełnych danych, a także do rozwoju technik rozdzielczych w czasie dla eksperymentów korelacyjnych i dyfuzyjnych. Algorytmy te prowadzą do istotnego skrócenia czasu pomiarów wielowymiarowych widm NMR makromolekuł i zostały dobrze zweryfikowane eksperymentalnie. Dr Krzysztof Kazimierzczuk udowodnił, że jest dojrzałym naukowcem, o wyróżniającym się dorobku naukowym, świetnie przygotowanym do samodzielnej pracy naukowo-badawczej.

### **Ocena dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego**

Droga naukowa dr Krzysztofa Kazimierzczuka związana jest z Wydziałem Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Dorobek naukowy Habilitanta jest znaczny. Oprócz 14 prac włączonych do habilitacji jest także współautorem innych 19 publikacji, z których 9 ukazało się w przed, a 10 po obronie pracy doktorskiej (5 z nich ma charakter przeglądu). Dr Kazimierzczuk publikuje w bardzo dobrych czasopiśmie naukowych. Łączna wartość IF dla wszystkich prac wynosi 120.6, zatem średnia wartość, około 3.7 jest wysoka. Prace dr Kazimierzczuka są dobrze cytowane (wg bazy Web of Science - 593 cytowania, bez cytowań własnych). Znajduje to odzwierciedlenie w stosowanym często do oceny osiągnięć naukowych indeksie Hirscha, który jest wysoki i wynosi 14 (bez autocytowań). Należy podkreślić, że w dorobku dr Kazimierzczuka znajduje się 9 prac mających ponad 30 cytowań, w tym 6 publikacji ma powyżej 50 cytowań. W przedstawionych materiałach dr Kazimierzczuk nie wyodrębnił z obszernej listy dorobku naukowego artykułów o charakterze przeglądowym. Jednak można znaleźć na niej 5 tego typu artykułów (1 w Progress in Nuclear Magnetic Resonance, 1 w Topics in Current Chemistry, 1 w ChemPhysChem i 2 w Magnetic Resonance in Chemistry). To bardzo wartościowe publikacje. Ocenę dorobku dr Kazimierzczuka ułatwia także odrębna lista wykładów konferencyjnych. Widać z niej, że Habilitant był 13-to krotnie zapraszany do wygłoszenia wykładów na konferencjach (lub szkołach) międzynarodowych i krajowych. Ten fakt dobitnie świadczy o międzynarodowym uznaniu dla osiągnięć naukowych dr Kazimierzczuka w dziedzinie NMR. Dr Krzysztof Kazimierzczuk jest także bardzo aktywny w zdobywaniu środków finansowych na badania. Kierował aż 6 projektami: 3 granty NCN (SONATA-BIS 2, HARMONIA i OPUS 9), 2 granty MNiSW, KOLUMB z FNP). Umiejętność zdobywania grantów to świetna rekomendacja na przyszłość dla lidera zespołu naukowego.

Dr Kazimierzczuk prowadzi bardzo owocną współpracę międzynarodową, która niewątpliwie przyczynia się do szybkiego pomnażania Jego dorobku naukowego, ale co najważniejsze, sprzyja jakości publikowanych prac, które wymagają współpracy specjalistów z różnych dziedzin chemii, fizyki i matematyki. Dr Kazimierzczuk jest także bardzo aktywny w organizowaniu w Polsce konferencji o zasięgu międzynarodowym, poświęconych spektroskopii NMR. Habilitant angażuje się w popularyzację nauki, występując w audycjach Polskiego Radia i prowadząc laboratoria NMR dla uzdolnionej młodzieży.

Dr Krzysztof Kazimierzczuk ma także spore osiągnięcia dydaktyczne. W okresie pracy na Wydziale Chemii UW prowadził różnorodnie zajęcia z spektroskopii molekularnej, przygotował nowe ćwiczenie z zakresu spektroskopii EPR, a także wykład poświęcony metodom stosowanym w biologii strukturalnej. Uczestniczył w 6 kursach spektroskopii NMR w ramach szkół w Warszawie, Wilnie i Göteborgu. Kierował 1 pracą magisterską. Obecnie, pracując w Centrum Nowych Technologii UW nie prowadzi już zajęć dydaktycznych. To wielka szkoda, bowiem dr Kazimierzczuk jest moim zdaniem utalentowanym wykładowcą i potrafi bardzo jasno przekazywać wiedzę, o czym mogłam się niejednokrotnie przekonać słuchając jego wystąpień seminaryjnych jeszcze w czasie studiów doktoranckich.

#### **Ocena końcowa**

W podsumowaniu stwierdzam, że zarówno przedłożona rozprawa habilitacyjna, całość bogatego i bardzo wartościowego dorobku naukowego oraz inne wynikające z przedłożonej dokumentacji osiągnięcia dr Krzysztofa Kazimierzczuka nie pozostawiają wątpliwości, że w wystarczającym stopniu spełnione są warunki określone w ustawie z dnia 18 marca 2011 r. o zmianie ustawy - Prawo o szkolnictwie wyższym, ustawy o stopniach i tytułach naukowych oraz stopniach i tytułach w zakresie sztuki (Dz. U. z 2011 r., nr 84, poz. 455) oraz rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 11 września 2011 roku w sprawie kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Wnioskuje zatem o dopuszczenie dr Krzysztofa Kazimierzczuka do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.



Jolanta Borucka-Bukowska