

Prof. dr hab. Edward Szłyk
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
Wydział Chemii
87-100 Toruń
ul. Gagarina 7

Toruń 31. 07. 2012r.

Recenzja całokształtu dorobku naukowego dr Renaty Jastrząb
ze szczególnym uwzględnieniem rozprawy habilitacyjnej
„ ZNACZENIE I WŁAŚCIWOŚCI KOMPLEKSUJĄCE GRUP FOSFORANOWYCH
ORAZ POLIFOSFORANOWYCH ZAWARTYCH W CZĄSTECZKACH
WYSTĘPUJĄCYCH W KOMÓRKACH ŻYWYCH ”

Dr Renata Jastrząb ukończyła studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu w 1995 roku i podjęła studia doktoranckie na macierzystym wydziale, uzyskując w 2000 stopień doktora nauk chemicznych za rozprawę: „Potencjometryczne i spektralne badania reakcji kompleksowania w układach nukleozydów i nukleotydydów z poliaminami i jonami metali”, której promotorem był Prof. dr hab. Lechosław Łomozik. Na Wydziale Chemii UAM pracuje od roku 2000 na stanowisku adiunkta w Zakładzie Chemii Koordynacyjnej kierowanym przez prof. L. Łomozika.

Ocena rozprawy habilitacyjnej

Habilitantka po doktoracie poszerzyła swoje zainteresowania badawcze o nowy obszar obejmujący określanie aktywności fosforanów w układach biologicznych, ponieważ reakcje fosforylacji i defosforylacji należą do najważniejszych procesów zachodzących w organizmach żywych.

Wyniki badań w kierunku rozprawy habilitacyjnej dr R. Jastrząb opublikowała w latach 2009-2011 w formie 8 prac oryginalnych, w tym dwóch samodzielnych, w czasopiśmie posiadającym Impact Factor (IF). Autorka rozprawy przygotowywała manuskrypty, w 5 pracach była pierwszym autorem, a w 3 autorem do korespondencji. Do zestawu publikacji

zespołowych Kandydatka załączyła oświadczenia współautorów potwierdzające ich udziały merytoryczne i procentowe, co ułatwia ocenę roli Habilitantki. Według deklarowanych oświadczeń udział dr R. Jastrząb wynosi od 75% (tylko w jednej pracy) do 100% czyli można przyjąć, że udział Habilitantki był jednoznacznie wiodący. Autorka samodzielnie wykonywała pomiary i interpretację badań potencjometrycznych, analizę widm VIS, EPR, NMR, IR, Ramana, CD oraz obliczenia metodą DFT. Z oświadczeń współautorów wynika, że tematyka badań pochodziła od Autorki, co potwierdza jej twórczą rolę w przygotowaniu rozprawy habilitacyjnej.

Sumaryczny IF dla 8 prac stanowiących rozprawę habilitacyjną wynosi 17,636, zaś całkowita liczba cytowań wynosi 8 (bez autocytowań wg bazy Scopus z 26.07.2012), co stanowi obecnie niewielką liczbę, ale ta powinna szybko rosnąć ze względu na krótki okres od ich opublikowania (maks. 3 lata). Wyniki rozprawy dr R. Jastrząb opublikowała w wiodących czasopismach z dziedziny chemii bionieorganicznej i koordynacyjnej: J. Solution Chem - 3; J. Coord. Chem. -1; J. Inorg. Biochem - 1; New J. Chem.-2; Metallomics - 1. Największą wagę naukową wnoszą prace opublikowane w trzech ostatnich z wymienionych wyżej czasopism, które potwierdzają jej merytoryczny zakres z dziedziny chemii bionieorganicznej. Parametry bibliometryczne rozprawy spełniają kryteria do wnioskowania o stopień doktora habilitowanego.

Oceniając merytoryczną wartość publikacji stanowiących rozprawę habilitacyjną należy stwierdzić, że są one jednorodne tematycznie. Autorka wydzieliła trzy obszary merytoryczne pogrupowane według złożoności układów i tworzących się oddziaływań niekowalencyjnych i koordynacyjnych. W pierwszym nurcie badań [H2, H4, H8] skoncentrowała się na opisie sposobu oraz stałych trwałości kompleksowania fosforanów związanych z aminokwasami, zawartych w nukleotydach adenozyne oraz w kwasie

fitynowym. Według mojej oceny najważniejsze osiągnięcia naukowe w tym obszarze rozprawy są następujące:

- a) stwierdzenie, że fosforany stanowią ujemne centrum niekowalencyjnych oddziaływań z polikationami organicznymi: putrescyna, spermidyna, spermina, fosfoseryny, bądź endocykliczny atom azotu pierścienia purynowego nukleotydu, które wynikają z całkowitej deprotonacji poliamin (przy pH ~ 9,0),
- b) grupa karboksylowa fosfoseryny tworzy wiązania niekowalencyjne będąc ujemnym centrum reakcji, a kompleksy pomiędzy fosfoseryną i aminą biogenną typu (Ser-P) Hx(PA) są najtrwalsze przy fizjologicznym pH,
- c) w układach Ser-P/nukleotyd adenozyne moc oddziaływań niekowalencyjnych fosforanów z cząsteczką nukleotydu maleje w szeregu ATP > ADP > AMP, zaś atom N(1) adeniny pełni rolę centrum dodatniego lub ujemnego w zależności od pH.

Drugi obszar zainteresowań Kandydatki to reakcje kompleksowania fosforanów przez Cu(II) w układach podwójnych opisane w pracach H1 i H6. Autorka przyjęła hipotezę, że procesy biochemiczne na poziomie molekularnym zachodzą z udziałem fosforanów zdolnych do wiązania jonów metali obecnych w organizmie. Za najważniejsze wnioski w tym zakresie należy uznać:

- a) ustalenie sposobu koordynacji Cu(II) w kompleksach typu ML: {2O} dla Cu(monoP), {2O} dla Cu(diP), {1O} dla Cu(triP) oraz {2O} dla Cu(tetrametaP), MHL oraz nowych ML(OH)_x w układach z udziałem polifosforanów lub polimetafosforanów,
- b) stwierdzenie, że wraz ze wzrostem długości łańcucha fosforanu maleje moc wiązania jonu metalu z fosforanem w szeregu: PO₄³⁻ > P₂O₇⁴⁻ > P₃O₅⁵⁻ > P₄O₁₂⁴⁻ > P₃O₉³⁻, co według Autorki wynika z wpływu ich struktury na trwałość kompleksów,

- c) w układach miedzi(II) z fosforylowanymi aminokwasami kompleksy typu : CuHSerP oraz CuSerP wykazują wiązania Cu-O(fosforan), za wyjątkiem seryny, która wiąże się poprzez grupę aminową i karboksylową.

Trzecim nurtem badań w tematyce rozprawy były reakcje kompleksowania fosforanów z Cu(II) w układach potrójnych prezentowane w pracach H3 i H7. Autorka założyła, że rozszerzenie układu Cu(II)/Ser-P o poliaminę, spowoduje znaczne zmiany w sposobie koordynacji i w systemie wiązań niekowalencyjnych powstających między ligandami. Za najistotniejsze wnioski tej części rozprawy można przyjąć:

- a) w układach z Put, Spd i Spm powstają kompleksy potrójne, zaś centrami reakcji są atomy tlenu grupy karboksylowej i fosforanów oraz atomy azotu fosfoseryny i poliaminy.
- b) aminy poniżej fizjologicznego odczynu znajdują się poza wewnętrzną sferą koordynacyjną Cu(II) i tworzą połączenia niekowalencyjne z ujemnie naładowaną grupą karboksylową lub fosforanową kompleksu Cu(HSer-P), zaś powyżej tego pH częściowo deprotonowana poliamina tworzy wiązania koordynacyjne,
- c) w układach podwójnych i potrójnych zawierających fosforylowane aminokwasy tendencja do tworzenia wiązań koordynacyjnych z udziałem $-OPO_3^{2-}$ maleje ze wzrostem pH.
- d) w układach Cu/Ser-P i w potrójnym Cu/Ser-P/PA oraz Cu(II)/Ser-P/nukleotyd (AMP, ADP lub ATP) sposób wiązania ligandów zależy od pH. Poniżej pH fizjologicznego, niezależnie od nukleotydu, fosfoseryna koordynuje tylko przez atom tlenu fosforanu, zaś ze wzrostem pH tworzą się wiązania z grupą aminową i karboksylową.

Osiągnięte wyniki zawierają elementy nowości naukowych i wskazują na znaczący wkład rozprawy w rozwój chemii biokoordynacyjnej amin biogennych i fosforanów z Cu(II), które mogą zachodzić w organizmach żywych. Dodatkowym walorem rozprawy jest analiza

wiązań metal-ligand (aminy biogenne, fosforany, nukleotydy) w roztworze wodnym, czyli zbliżonym do naturalnego środowiska biologicznego. Tematyka rozprawy habilitacyjnej jest spójna, co wynika z wymienionych powyżej ligandów i jonu centralnego. Wartość naukowa rozprawy jednoznacznie wynika z wypunktowanych powyżej najważniejszych wyników badań nad oddziaływaniami i budową kompleksów Cu(II) w roztworze wodnym. Do opublikowanych prac Autorka dołączyła ich opracowanie (konspekt), który zawiera wnioski wynikające z usystematyzowania publikacji. Niestety razi w nim używanie żargonu: „koordynacja tlenowa”, „ilość protonów w cząsteczce”, „ilości atomów tlenu w wewnętrznej sferze”.

Recenzowane publikacje potwierdziły umiejętność Habilitantki do samodzielnego planowania, prowadzenia i opisywania w sposób naukowy badań. Można więc uznać, że Autorka zrealizowała cele badań w kierunku rozprawy, zaś zbiór 8 publikacji stanowi rozprawę habilitacyjną.

Ocena dorobku naukowego

Do całkowitego dorobku naukowego dr R. Jastrząb zaliczyć należy 24 prace z listy filadelfijskiej, a nie 25, ponieważ jedna jest dopiero zaakceptowana do druku. Autorka podaje sumaryczny IF według Journal Citation Report IF=54,639 (zgodnie z rokiem opublikowania), zaś średni IF na pracę wynosi 2,186. Całkowita liczba cytowań osiągnęła 221 (bez autocytowań wynosi 127), a index Hirscha = 7 (wszystkie dane za Web of Science). Są to parametry najczęściej osiągnane przez habilitantów w ostatnich latach, chociaż zwraca uwagę duża liczba autocytowań Habilitantki (94/221). Do tego dorobku można dodać autorstwo 6 publikacji naukowych, a nie 11 jak dokumentach, w Annales of Pol. Chem. Soc., (częściowo nierecenzowane) o znikomym oddziaływaniu, 3 artykuły w monografiach, „Na pograniczu chemii i biologii” i z chemii analitycznej wydawnictwa UAM (Autorka nie

podała czy były recenzowane). Dwa skrypty dydaktyczne wydane przez UAM pomyłkowo podane zostały jako publikacje naukowe.

Uzyskane wyniki po doktoracie przedstawione zostały także w 11 prezentacjach na konferencjach międzynarodowych (plakaty) i na 23 konferencjach krajowych (w tym 3 wygłoszone komunikaty, 1 wykład na zaproszenie oraz jedno zaproszenie do wygłoszenia wykładu w 2012). Jest to dowód aktywności Habilitantki w przedstawianiu wyników badań środowisku chemików i świadczy o zrozumieniu wagi poddawania swoich wyników dyskusji naukowej, co dobrze prognozuje przyszłej samodzielnej pracy naukowej.

Oceniając dorobek naukowy po doktoracie, nie wchodzący w skład rozprawy habilitacyjnej - 16 prac oryginalnych z IF i 3 artykuły monograficzne, należy stwierdzić, że obejmuje on merytorycznie: badania oddziaływań jonów: Cu(II), Ag(I), Zn(II) z aminami biogennymi, nukleozydami, nukleotydami, kwasami organicznymi, aminokwasami, fosforylowanymi aminokwasami oraz zasadami Schiffa, przebadane identycznymi metodami, jak w rozprawie. Prace te opublikowane zostały w czasopismach z IF o znaczeniu światowym; J. Inorg Biochem - 6, Metallomics - 1, Coord. Chem. Rev. - 1, międzynarodowym: New J. Chem - 6, Polyhedron - 1, Inorg. Ch. Acta - 1. Polish J. Chem. 1 i w specjalistycznym J. Solution Chem. - 7. Wszystkie publikacje dotyczą tematyki bionieorganicznej, a w szczególności oddziaływań koordynacyjnych i niekowalencyjnych w roztworach o składzie: amina biogenna-jon metalu – nukleotydy czyli zbliżonej do rozprawy. Jakość czasopism, pod względem rangi uznanej przez środowisko chemików koordynacyjnych i czynniki bibliometryczne, pozwala określić dorobek, poza rozprawą habilitacyjną, jako poważny merytorycznie i statystycznie, czyli wystarczający do nadania stopnia naukowego doktora habilitowanego.

Habilitantka przejawiała także aktywność naukową poprzez udział jako wykonawca lub główny wykonawca w realizacji 5 projektów KBN i MNiSzW kierowanych przez

Kierownika Zakładu prof. L. Łomozika na temat zbliżony do habilitacyjnego i jeden bilateralny z Japonią - prof. Akira Odani (strona japońska).

Dodatkowo należy podkreślić umiejętność dr R. Jastrząb do prowadzenia współpracy naukowej z innymi grupami badawczymi, co udowodniła biorąc udział jako wykonawca projektu prof. M. Kaczmarek WCh UAM oraz z dr Tomaszem Runką z Wydziału Fizyki Technicznej P. Poznańskiej, tudzież w międzynarodowej z prof. Akirą Odani z Kanazawa University, Japonia. Osiągnięcia w pracy badawczej zostały docenione przez Rektora UAM w postaci nagrody za osiągnięcia naukowe (2004). Habilitantka posiada już pewne uznanie na arenie międzynarodowej ponieważ wykonywała recenzje publikacji dla czasopism z listy filadelfijskiej (J. Sol. Chem., Inorg. Chim. Acta, J. Mol. Str.).

Podsumowując można stwierdzić, że Pani dr R. Jastrząb nabyła umiejętność prowadzenia samodzielnych badań naukowych oraz włączania się w międzynarodowe grupy badawcze.

Ocena działalności dydaktycznej

Praca dydaktyczna Habilitatnki polegała na prowadzeniu laboratoriów, proseminariów oraz ćwiczeń rachunkowych na macierzystym wydziale i dla Wydziału Biologii UAM. Autorka wymienia także zajęcia dydaktyczne w Ośrodkach Zamiejscowych UAM w Krotoszynie (2002-2005), Śremie (2001-2006) i na studiach podyplomowych dla nauczycieli w tej samej formie. Na kierunkach zamawianych Biotechnologia i Ochrona Środowiska 2011/2012 prowadziła wykłady, ale nie podała jaka była tematyka. Do ważnych osiągnięć należy dodać współautorstwo dwóch skryptów dla studentów I roku Chemii, I roku Biologii i redagowanie angielskiej wersji skryptu z Podstaw Chemii dla studentów anglojęzycznych I roku Chemii.

Działalność organizacyjna dydaktyki obejmowała: pełnienie funkcji opiekuna roku studiów I stopnia w latach 2009-2012, udział w Radzie Programowej Wydziału Chemii UAM od 2011, przygotowywanie nowego programu studiów dla kierunku chemia I i II stopnia według Krajowych Ram Kwalifikacji, członkostwo w Komisji Rektorskiej ds. akceptacji efektów

kształcenia na studiach I i II stopnia oraz jednolitych studiach magisterskich w obszarze nauk ścisłych od IV 2012. Jest to działalność typowa dla adiunktów, a część wymienionych form należy do obowiązków nauczyciela akademickiego. Niestety brakuje prowadzenia wykładów, poza wymienionym enigmatycznie, choćby specjalistycznych, które dobrze przygotowują do roli samodzielnego pracownika nauki. Zaangażowanie Habilitantki w proces dydaktyczny zyskało uznanie Rektora UAM w formie nagrody za osiągnięcia w działalności dydaktycznej (2011). Dla rozwoju umiejętności dydaktycznych odbyła 3 wizyty dydaktyczne w ramach programu Erasmus w Hiszpanii (Universitat Rovira i Virgili) i 1 w Bułgarii, University of Chemical Technology and Metallurgy oraz 1 naukową w Kanazawa University u prof. Akira Odani (3 tygodnie).

Wniosek końcowy do Rady Wydziału Chemii UAM

Na podstawie przedstawionych do oceny dokumentów stwierdzam, że rozprawa habilitacyjna i dorobek naukowy dr Renaty Jastrzab spełniają warunki stawiane przez Ustawę o stopniach i tytule naukowym i wnoszę o dopuszczenie do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Edward Sityk