



Prof. dr hab. Małgorzata Jeżowska-Bojczuk

Wrocław, 5.07.2012 r.

**Ocena całokształtu dorobku naukowego, dydaktycznego i organizacyjnego
dr Renaty Jastrząb ze szczególnym uwzględnieniem jej rozprawy
habilitacyjnej
pt. „Znaczenie i właściwości kompleksujące grup fosforanowych oraz
polifosforanowych zawartych w cząsteczkach występujących w komórkach
żywych”**

Pani dr Renata Jastrząb jest absolwentką Wydziału Chemii Uniwersytetu Poznańskiego, który ukończyła w roku 1995 broniąc pracę magisterską pt. „Oddziaływania metal - ligand i ligand - ligand w trójskładnikowych układach miedź(II)/nukleozyd/poliamina”, wykonaną pod kierunkiem profesora Lechosława Łomozika. Następnie rozpoczęła studia doktoranckie uzyskując w roku 2000, po obronie rozprawy doktorskiej pt. „Potencjometryczne i spektralne badania reakcji kompleksowania w układach nukleozydów i nukleotydydów z poliaminami i jonami metali” stopień naukowy doktora nauk chemicznych. Promotorem jej pracy doktorskiej był również Pan profesor Łomozik. Dalsza droga zawodowa dr Renaty Jastrząb była i jest związana z macierzystym Wydziałem, gdzie od roku 2000 jest zatrudniona na stanowisku adiunkta w Zakładzie Chemii Koordynacyjnej.

Najogólniej formułując tematyka badawcza uprawiana przez Habilitantkę lokuje się na styku chemii supramolekularnej oraz chemii bionieorganicznej. Głównym zaś założeniem badawczym obejmującego osiem publikacji jednotematycznego cyklu prac, jest scharakteryzowanie aktywności ugrupowania fosforanowego w modelowych układach

biologicznych. Autorka rozprawy dla realizacji tak zarysowanego celu badawczego jako przedmiot swoich badań wybrała następującą grupę ligandów: fosforylowane aminokwasy (a konkretnie serynę), mono-, di- i trifosforanowe nukleotydy adenozyne i zawierający sześć grup fosforanowych kwas fitynowy. Biologicznemu uzasadnieniu takiego doboru ligandów i opisowi ich rozlicznych funkcji w układach żywych, jak np. między innymi procesowi fosforylacji białek, czy też zdolnościom kompleksotwórczym związków zawierających grupę fosforanową dr Renata Jastrząb poświęciła dużo uwagi zarówno we wprowadzeniu do autoreferatu oraz we wstępach do poświęconych tym zagadnieniom publikacji.

By sprostać rozwiązaniu tych problemów i móc w pełni opisać badane układy Habilitantka z dużą wprawą i znajomością tematu posługuje się całą gamą eksperymentalnych metod badawczych poczynając od potencjometrii dającej jej informacje o właściwościach kwasowo-zasadowych badanych układów oraz o stechiometrii i wartościach stałych trwałości ich kompleksów molekularnych tworzonych przez bioligandy oraz kompleksów z jodem miedziowym, poprzez metody obliczeniowe (DFT), po szereg metod spektroskopowych - elektronową spektroskopię absorpcyjną, spektroskopię dichroizmu kołowego, EPR, NMR, spektroskopię w podczerwieni oraz spektroskopię ramanowską - stosowanych dla ustalenia ich podstawowych właściwości strukturalnych. Powyższy zestaw metod badawczych pozwolił dr Jastrząb na pełny opis badanych układów i wysnucie jednoznacznych wniosków z przeprowadzonych eksperymentów.

Rozwiązane przez siebie zagadnienia Habilitantka zgrupowała w rozprawie habilitacyjnej pt. „Znaczenie i właściwości kompleksujące grup fosforanowych oraz polifosforanowych zawartych cząsteczkach występujących w komórkach żywych” w logicznie następujących po sobie czterech podrozdziałach. Całość rekapituje krótkie podsumowanie, w moim poczuciu zbyt krótkie i niepełne oraz podrozdział, w którym wypunktowane zostały główne osiągnięcia pracy habilitacyjnej. Podział na cztery różne tematycznie podrozdziały jest zgodny z prowadzoną i prezentowaną w ośmiu publikacjach cyklu habilitacyjnego tematyką badawczą pani dr Renaty Jastrząb, a zastosowane podejście pomimo oczywistego rozkładu tych treści pomiędzy poszczególne publikacje, umożliwia łatwiejszy ogląd naukowych dokonań pani doktor. Toteż moją ich ocenę przeprowadzę posługując się zaproponowanym przez nią schematem.

„Udział grup fosforanowych w oddziaływaniach niekowalencyjnych”

Badania oddziaływań niekowalencyjnych są bardzo istotne dla zrozumienia większości procesów zachodzących w komórkach organizmów żywych. Treści odpowiadające

powyższemu tytułowi Autorka zawarła w trzech publikacjach oznaczonych jako H2, H4 i H8. Dwie pierwsze z nich opublikowane zostały w roku 2009 w J. Solution Chem. a dotyczą efektywności grupy fosforowej w niekowalencyjnym oddziaływaniu pomiędzy fosfoseryną a nukleotydami adenozyliny lub aminami biogennymi, ostatnia w roku 2010 w Metallomics . Praca ta poświęcona została m.in. opisowi analogicznych oddziaływań kwasu fitynowego z poliaminami. Autorka bezspornie udowodniła fakt tworzenia się kompleksów molekularnych w badanych układach. Do ich powstania prowadzą słabe oddziaływania o charakterze niekowalencyjnym pomiędzy ujemnie naładowanymi grupami fosforanowymi lub karboksylowymi a dodatnio naładowanymi grupami aminowymi badanego aminokwasu i aminy biogennej lub też endocykliczny atom azotu pierścienia purynowego nukleotydu. Wykazała również istnienie pH-zależności tych oddziaływań, dowodząc, co jest interesujące ze względu na potencjalne zastosowania medyczne tych wyników, że najtrwalsze połączenia niekowalencyjne, w których czynnie uczestniczy grupa fosforanowa, powstają w pH, w którym fosforan jest już całkowicie zdeprotonowany. Dr Jastrząb wykazała ponadto, że na charakter opisywanych oddziaływań ma wpływ nie tylko ładunek liganda, ale także struktura i wielkość danej cząsteczki. Ciekawie również wypadły wyniki porównania trwałości kompleksu jaki tworzy kwas fitynowy z jonem magnezu oraz trwałości jego kompleksu molekularnego z tetraaminą, które wykazały większą trwałość termodynamiczną tego ostatniego.

„Reakcje kompleksowania grup fosforanowych z Cu(II) w układach podwójnych”

Następnym logicznym krokiem badawczym było sprawdzenie w jaki sposób badane dotychczas ligandy będą oddziaływały z jonem metalu. Doboru tego jonu dr Jastrząb dokonała mając na uwadze zarówno jego właściwości wiążące, jak i właściwości biologiczne, czyli funkcje pełnione w organizmie. Do śledzenia procesów kompleksowania ligandów przez jony metali niezbędna jest znajomość ich struktury oraz mających miejsce w roztworze procesów ich stopniowej deprotonacji. Habilitantka była gotowa do podjęcia takich badań zarówno warsztatowo, jak i ze względu na wysoki poziom wiedzy o zachowaniu się w roztworach wodnych poszczególnych badanych przez nią związków. Zagadnienia te zostały przedstawione w dwóch publikacjach wchodzących w skład rozprawy habilitacyjnej, w opublikowanej w roku 2009 w J. Coord. Chem. pracy zatytułowanej „Coordination mode in the binary systems of copper(II)/O-phospho-L-serine” (H1) oraz w 2010 w J. Solution Chem. pracy o pt. “Stability and Coordination Mode of Complexes of Polyphosphates and Polymetaphosphates with Copper(II) Ions in Aqueous Solution - Potentiometric, Spectral and Theoretical Studies” (H6). W obu publikacjach w rzetelny i dokładny sposób przeprowadzono serię eksperymentów,

których wyniki pozwoliły na stwierdzenie jakiego rodzaju kompleksy i o jakiej stechiometrii tworzą się w roztworze wodnym wraz ze wzrostem jego wartości pH. Autorka dowiodła także istnienie zależności pomiędzy długością oraz strukturą łańcucha liganda (porównanie polifosforan-polimetafosforan), a trwałością kompleksów. Kombinacja potencjometrii z metodami spektroskopowymi i DFT pozwoliła na wyznaczenie pełnego, bo opisującego całą skalę pH, modelu koordynacji. Opisała też znaną dla donorów azotowych zależność pomiędzy lokalizacją pasma d-d, a ilością skoordynowanych do jonu metalu donorów tlenowych, która może być pomocna w strukturalnej charakterystyce kolejnych ligandów zawierających tego typu ugrupowania donorowe. Natomiast w przypadku kompleksów binarnych Cu(II)-Ser-P, Habilitantka zaobserwowała ciekawą rearanżację sfery koordynacyjnej jonu miedziowego mającą miejsce wraz ze wzrostem wartości pH badanego roztworu świadcząca o spadku efektywności wiążącej grupy fosforanowej podobnie, jak to miało miejsce w przypadku kompleksów molekularnych. Sugerowano, że wyłączenie grupy fosforanowej z procesu koordynacji, daje jej potencjalną możliwość by np. w organizmie wejść w oddziaływanie niekowalencyjne z innymi bioligandami lub koordynacyjne z innym jonem metalu faworyzującym wiązanie do donorów tlenowych.

„Reakcje kompleksowania grup fosforanowych z Cu(II) w układach potrójnych”

Kolejny nurt badawczy prezentowany w rozprawie habilitacyjnej dr Renaty Jastrząb dotyczy kompleksów ternarnych. Poświęcono temu dwie publikacje H3 i H7, najbardziej moim zdaniem wartościowe wśród zgłoszonych do habilitacji ze względu na to, że są to zupełnie samodzielne badania Habilitantki (H3 - “Phosphoserine and specific types of its coordination in copper (II) and adenosine nucleotides systems - potentiometric and spectroscopic studies”, J. Inorg. Biochem., 2009 oraz H7 - “The influence of copper (II) ions on noncovalent interactions in the systems including phosphoserine and biogenic amines”, New J. Chem., 2010). W tym wypadku ligandami oprócz fosfoseryny były nukleotydy adenzynowe lub aminy. Te skomplikowane i interesujące badania opisują jakie, układ ternarny, czyli obecność w roztworze dwóch ligandów konkurujących o wiązanie z jonem Cu(II), powoduje zmiany zarówno w sposobie koordynacji, jak i w oddziaływaniach niekowalencyjnych w porównaniu do układu binarnego, czy też do relacji samych ligandów. Tak jak poprzednio drastyczna zmiana koordynacji obserwowana jest w okolicach pH fizjologicznego. Poniżej pH 7 oba układy ternarne Cu(II)-Ser-P-amina i Cu(II)-Ser-P-nukleotyd koordynują analogicznie jak ich binarne odpowiedniki, nie angażując w proces wiązania metalu aminy/nukleotydu, które

uczestniczą tylko w tworzeniu oddziaływań niekowalencyjnych. W pH powyżej 7 procesy deprotonacyjne poliamin/nukleotydów włączają je w proces koordynacji.

„Wpływ nadmiaru poliaminy na sposób koordynacji bioligandów w pH fizjologicznym”

W tym obszarze badawczym ciekawych m.in. ze względu na potencjalną farmakologiczno-medyczną aplikacyjność wyników (w komórkach nowotworowych wzrasta znacznie stężenie poliamin), dostarczyły badania czteroskładnikowych układów typu Cu(II)-ATP-Ser-P-poliamina, w których zmieniono stosunek molowy poszczególnych komponentów z 1:1:1:1 na 1:1:1:10 (H5 „The effect of spermine concentration on the solution structure of complexes formed in copper(II)/adenosine 5'-triphosphate/phosphoserine system”, J. Inorg. Biochem. 2010). Pozwoliło to na uzyskanie informacji, że podwyższenie stężenia poliaminy skutkuje zmianą sposobu koordynacji tego układu, natomiast nie ma wpływu na jego stechiometrię.

Całkowity dorobek naukowy dr Renaty Jastrząb nie jest zbyt obszerny i zamyka się liczbą 25 ogłoszonych drukiem oryginalnych prac naukowych z listy filadelfijskiej. Niestety Habilitantka nie wyodrębniła w spisie swoich prac, tych które zostały opublikowane przed doktoratem. Można jedynie przypuszczać śledząc daty, że przed doktoratem była współautorką jednej, dwóch lub ewentualnie trzech z nich. Jakkolwiek by nie liczyć warto zauważyć znaczący ich przyrost po roku 2000. Sumaryczny (również bez wyodrębnienia na dorobek przed i po doktoracie) Impact Factor publikacji dr Jastrząb wynosi 54.64. Średni IF na jedną pracę jest równy 2.156 i jest to dobry wynik, podobnie jak wartość współczynnika IF dla całości jej dorobku publikacyjnego. Publikacje pani dr Jastrząb cytowane były 127 razy, a ich indeks Hirscha wynosi 7.

W skład dorobku Habilitantki wchodzi także współautorstwo 6 prac opublikowanych w *Annals of the Polish Chemical Society*, dwóch opracowań dydaktycznych dla studentów dotyczących ćwiczeń laboratoryjnych z chemii ogólnej i nieorganicznej wydanych przez Wydział Chemii UAM oraz dwóch rozdziałów w wydawanej przez Wydawnictwo Naukowe UAM w Poznaniu cyklicznej monografii „Na pograniczu chemii i biologii”. Jest ona również współautorką 11 posterów prezentowanych na międzynarodowych konferencjach naukowych oraz 23 wystąpień na konferencjach krajowych, w tym trzech ustnych komunikatów i dwóch wykładów. Warto w tym miejscu zwrócić uwagę na wysoką aktywność Habilitantki w popularyzowaniu swoich osiągnięć badawczych.

Przedstawiony do oceny jednotematyczny zestaw publikacji składających się na cykl habilitacyjny liczy jak wspomniano powyżej osiem prac z listy filadelfijskiej, których

sumaryczny IF równy jest 17.636, zaś średni na jedną publikację 2.204. Brak jest jednak informacji o ilości ich cytowań. Ponieważ jednak prace te pochodzą z lat 2009-2011 prawdopodobnie nie mają ich jeszcze zbyt wiele. Zarówno bowiem na ilość cytowań, jak i na wartość indeksu Hirscha, pracuje się długo i w przypadku prac opublikowanych w ostatnich latach parametry te nie są w stanie osiągnąć jeszcze swego apogeum.

Publikacje należące do cyklu habilitacyjnego pani dr Renaty Jastrzab są głównie dwuautorskie, a drugim ich autorem jest profesor Łomozik. W czterech z nich przy nazwisku profesora znajduje się gwiazdka (lub adres osoby, do której powinna być kierowana korespondencja), w jednej zlokalizowana jest przy nazwisku profesora Akiro Odaniego. Zwyczajowo świadczy ona o tym, że jest się autorem wiodącym danej publikacji. Znajduję ten fakt w pewnej sprzeczności z oświadczeniami obu Panów profesorów, w których określają oni swój wkład jako udział w dyskusji, czyli udział w formie doradztwa bądź konsultacji. Wśród omawianych publikacji znajduje się jedna, w której Autorka rozprawy jest autorem korespondencyjnym i dwie, których jest jedynym ich autorem. To świetnie, że one powstały, gratuluję. W chemii eksperymentalnej zdarza się to raczej rzadko i przeważnie mamy do czynienia z pracami wieloautorskimi. Fakty te unaoczniają próbę wykreowania przez dr Jastrzab własnej tematyki, własnej linii badawczej. Co warto podkreślić publikacje te ukazały się w czasopiśmie o wysokich impact faktorach 3.252 i 2.631, odpowiednio w JIB oraz New J. Chem. Udziały własne w pozostałych sześciu publikacjach „habilitacyjnych” Autorka szacuje na osiągające 75% i powyżej (a konkretnie na: 75, 80, (3x 85) i 95%). Szacunki te są w pełnej zgodzie z oświadczeniami pozostałych ich autorów. Swój wkład w oceniane w poniższej procedurze publikacje dr Jastrzab określa skromnie jako „wykonanie i interpretację badań potencjometrycznych połączonych z komputerową analizą danych, badań spektralnych w tym vis, EPR” NMR, IR oraz obliczeń teoretycznych DFT” oraz przygotowanie manuskryptów, podczas gdy równie istotna jest koncepcja pracy, czyli pomysł na nią, znalezienie problemu badawczego.

Co bardzo ważne dla oceny dorobku habilitacyjnego większość lub też całość badań prowadzonych przez Habilitantkę była prowadzona w ramach realizacji grantów badawczych. Pani dr Renata Jastrzab uczestniczyła bowiem jako wykonawca lub główny wykonawca w realizacji czterech projektów badawczych MNiSzW (KBN) i jednego projektu międzynarodowego. W marcu bieżącego roku dr Jastrzab złożyła w NCN projekt badawczy kolejnego grantu, w którym miała pełnić funkcję jego kierownika. Został on złożony, jak pisze w swoim autoreferacie, w konkursie Harmonia, który jest przeznaczony na finansowanie

projektów badawczych realizowanych w ramach współpracy międzynarodowej. Niestety nie znalazłam nazwiska Habilitantki wśród beneficjentów tego konkursu. Istotny nie mniej jednak jest sam fakt podjęcia starań o pozyskanie funduszy na realizację swoich planów badawczych.

Na rozwój naukowy Habilitantki niewątpliwie pozytywny wpływ miały odbyte przez nią staże naukowe. Przed doktoratem osiem miesięcy w latach 1995-96 spędziła w Instytucie Fizyki Molekularnej PAN, gdzie pracowała pod kierunkiem prof. Stanisław Hoffmana. Pozostałe staże były już tylko krótkoterminowe. Były to dwukrotne trzytygodniowe wizyty w Japonii w Kanzawa University u prof. Akira Odani współpracującego z grupą prof. Łomozika, trzykrotne jednotygodniowe wizyty w Hiszpanii (Universitat Rovira i Virgili, Centro Tecnológico de la Quimica de Cataluna) oraz w Bułgarii (University of Chemical Technology and Metallurgy).

W dorobek zawodowy dr Renaty Jastrząb bardzo pozytywnie wpisuje się jej zaangażowanie w działalność dydaktyczną. Od roku 2001 prowadzi zajęcia laboratoryjne, proseminaria i ćwiczenia rachunkowe. Co jest ważne prowadzi również wykłady na zajęciach wyrównawczych z Podstaw Chemii dla studentów Wydziału Biologii UAM. Jest także współautorką dwóch skryptów dla studentów I roku. Jest więc doświadczonym nauczycielem akademickim. Dziwi mnie jedynie następująca informacja zawarta w dostarczonych dokumentach, że dr Jastrząb świadczyła „pomoc naukowo-dydaktyczną przy wypromowaniu 10 prac magisterskich”. Dlaczego będąc doktorem nauk chemicznych nie podjęła się samodzielnego promotorstwa prac magisterskich?

Działalność naukowa i dydaktyczna Habilitantki znalazły uznanie w oczach władz Uczelni, dwukrotnie bowiem w latach 2004 i 2011 uzyskała za nie nagrody JM Rektora UAM. Uznanie naukowego potencjału dr Jastrząb jest powierzenie jej przez edytorów trzech czasopism (J. Sol. Chem., Inorg. Chim. Acta, J. Mol. Struc.) obowiązków recenzenta oraz powierzenie jej ekspertyz w zakresie analizy związków wchodzących w skład schelatowanych nawozów mineralnych przez firmę ADOB.

Również działalność organizacyjna jest widoczna w życiu zawodowym pani dr Renaty Jastrząb. Angażuje się bowiem zarówno w prace na rzecz własnego Wydziału, jak i na rzecz Uczelni pracując w Radzie Programowej Wydziału Chemii w celu przygotowywania nowego programu studiów według wytycznych Krajowych Ram Kwalifikacji oraz będąc członkiem Komisji Rektorskiej ds. akceptacji efektów kształcenia w obszarze nauk ścisłych. W roku 2005 Habilitantka uczestniczyła w pracach na rzecz organizacji zjazdu PTChem, którego jest członkiem od roku 2004.

W konkluzji pragnę podkreślić, że wyniki prac badawczych opublikowanych przez panią dr Renatę Jastrząb wnoszą wkład w badania podstawowe, istotnie poszerzając wiedzę w dziedzinie chemii supramolekularnej i bionieorganicznej. Całokształt przedstawionego dorobku świadczy, o jej dojrzałości naukowej i kreatywności. Habilitantka zdobyła wiele umiejętności tak do projektowania badań, jak i ich przeprowadzania.

Uważam, że rozprawa habilitacyjna oraz dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny Habilitantki spełniają wymagania określone w ustawie z 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595, z późno zm.). Na tej podstawie zwracam się do Rady Wydziału Chemii Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu z wnioskiem o dopuszczenie dr Renaty Jastrząb do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

M. Sforke Ziobła-Bejda