

## Recenzja

**rozprawy habilitacyjnej w postaci osiągnięcia naukowego oraz pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych, dorobku dydaktycznego i popularyzatorskiego, współpracy naukowej i działalności organizacyjnej**

**Tytuł osiągnięcia:** Charakterystyka wybranych pochodnych  $\alpha$ -tokoferolu w układach homo- i heterogenicznych.

**Autor osiągnięcia:** dr inż. Grażyna Neunert.

**Cel wykonania recenzji:** Postępowanie o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk rolniczych w dyscyplinie technologia żywności i żywienia Pani dr inż. Grażynie Neunert.

**Organ prowadzący:** Wydział Nauk o Żywności i Żywieniu Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu.

**Autor recenzji:** Prof. dr hab. Piotr Koczoń.

### 1. Podstawowe dane o Kandydatce

Kandydatka uzyskała stopień naukowy doktora nauk fizycznych w zakresie fizyki, nadany uchwałą Rady Wydziału Fizyki Technicznej Politechniki Poznańskiej w dniu 10 listopada 2005 r., w oparciu o przedstawioną do obrony pracę doktorską zatytułowaną „Kinetyka elektroluminescencji komórek z jedną warstwą czynną ZnS: Mn, Cu, Cl”. Promotorem pracy był dr hab. Eugeniusz Chimczak, prof. nadzw., a recenzentami w przewodzie doktorskim byli dr hab. Wacław Bała, prof. nadzw. oraz dr hab. Marek Kozielski, prof. nadzw.

Kandydatka nie ubiegała się dotychczas o stopień naukowy doktora habilitowanego.

### 2. Przebieg pracy naukowo-zawodowej (miejsce pracy, zajmowane stanowiska)

Obecne miejsce pracy Kandydatka zajmuje od października 2007 roku. Jest to Katedra Fizyki i Biofizyki Wydziału Nauk o Żywności i Żywieniu, Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu. Kandydatka pracuje tam na stanowisku adiunkta. Wcześniej w roku 2006 pracowała jako specjalista w Zakładzie Teorii Ciała Stałego, Wydziału Fizyki, Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, a w latach 2006 – 2007 zatrudniona była na stanowisku asystenta w Katedrze Fizyki, Wydziału Nauk o Żywności i Żywieniu, Akademii Rolniczej im. Augusta Cieszkowskiego w Poznaniu.

### 3. Informacje o obowiązujących przepisach prawa na dzień wszczęcia ocenianego postępowania habilitacyjnego, w tym obowiązujących kryteriach oceny.

Kandydatka ubiega się o stopień naukowy doktora habilitowanego na podstawie art. 219 ust. 1 pkt. 2 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2018 r. poz. 1668 ze zm.).

Recenzja wykonana jest w oparciu o:  
219 ust. 1 pkt 2 i 3 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.)

#### **4. Informacja o ocenianych osiągnięciach naukowych**

##### **4.1 Tytułu osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę ubiegania się w aktualnym postępowaniu o nadanie stopnia doktora habilitowanego**

Kandydatka, dr inż. Grażyna Neunert przedstawiła do recenzji osiągnięcie naukowe, zatytułowane „Charakterystyka wybranych pochodnych  $\alpha$ - tokoferolu w układach homo- i heterogenicznych” w postaci zestawu pięciu publikacji naukowych, tworzących cykl powiązanych tematycznie prac opisujących tytułowe zagadnienie. Zestaw ten stanowi podstawę ubiegania się Kandydatki o stopień naukowy doktora habilitowanego. Prace wchodzące w skład osiągnięcia opublikowane zostały w czasopismach o zasięgu międzynarodowym: (1) Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy; (2) Biophysical Chemistry; (3) Materials Science and Engineering C; (4) Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology; (5) Chemistry and Physics of Lipids. Uzupełnieniem dokumentacji związanej z ubieganiem się o stopień naukowy doktora habilitowanego jest autoreferat Kandydatki wraz z załącznikami.

##### **4.2 Dane naukometryczne, w tym sumaryczny współczynnik Impact Factor, sumaryczna punktacja ministerialna, liczba cytowań oraz indeks Hirscha Kandydatki na dzień wszczęcia postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego oraz po uzyskaniu ostatniego awansu naukowego**

Prace Kandydatki zarówno te wchodzące w skład osiągnięcia naukowego jak i pozostałe, są opublikowane w rozpoznawalnych na całym świecie czasopismach naukowych, a informacje podawane w tych pracach są wykorzystywane przez innych autorów, o czym świadczy powoływanie się na wyniki prezentowane przez Kandydatkę w tych pracach (tzw. cytowania). Kategoryzacji liczbowej prac naukowych dokonuje się przy pomocy współczynnika wpływu IF (Impact Factor). Dorobek publikacyjny Kandydatki, Pani dr Neunert jest znaczny, ma wysoką jakość naukową, sumaryczny IF prac opublikowanych z udziałem Kandydatki na dzień wszczęcia postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego wynosi **40.983** (40.510 po ostatnim awansie naukowym), przy czym dla prac zebranych jako osiągnięcie naukowe IF wynosi **13.047**. Wartość tego wskaźnika jest wysoka zarówno w przypadku pięciu wyselekcjonowanych prac, jak również dla całego zbioru prac Kandydatki. Zgodnie z punktacją nadaną i nadzorowaną przez MNiSW, (tzw. punktacja ministerialna) wszystkim pracom Kandydatki przypisano **598** punktów (583 po ostatnim awansie naukowym), a prace tworzące podstawę do ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego zgromadziły **135** punktów. Jak wspomniano wyżej, prace Kandydatki nie przechodzą bez echa w międzynarodowym środowisku naukowym, ich zauważalność potwierdza powoływanie się autorów prac z tych samych i podobnych dziedzin na wyniki prezentowane w pracach Kandydatki. Całkowita liczba cytowań prac Kandydatki wynosi **216** (wszystkie po ostatnim awansie naukowym), przy czym **18** z nich to autocytowania. Autocytowania wskazują na cykliczne i tematyczne działania naukowe Kandydatki. Powołując

się na własne wyniki Autorka wskazuje ich ważność i konieczność ich uzyskania przed przeprowadzeniem kolejnych eksperymentów. Wskazuje to również na systematyczną, poszukiwawczą i pogłębiającą nieznaną zagadnienia działalność eksperymentatorską Kandydatki. Liczba cytowań tj. 198 przez około 14 lat to około 14 cytowań każdego roku. Potwierdza to ważność i jakość prac Kandydatki.

Jakość wyników uzyskiwanych przez Kandydatkę i celowość prowadzonych badań jest potwierdzona wzrastającym systematycznie indeksem Hirsha (HF). Po uzyskaniu ostatniego awansu naukowego Indeks Hirsha wynosił 0. Na dzień wszczęcia przewodu indeks ten wynosił 8, co oznacza, że 8 prac było co najmniej 8 razy cytowanych.

Prace tworzące cykl habilitacyjny mają następujące liczby cytowań: 12, 7, 8, 1, 9. Jest to potwierdzenie faktu, że zgłaszany cykl prac (być może poza jedną pozycją) znajduje duże zainteresowania wśród czytelników na całym świecie. Szczególnie istotne są prace nowsze, jak ta z roku 2018 cytowana 9 razy. Jedna z prac z roku 2016 jest cytowana wprawdzie tylko raz, ale inna praca z tego samego roku ma już 7 cytowań. Wysoki HF dokumentuje fakt dobrego przygotowania każdej pracy, w tym umieszczania w każdej z nich wartościowych, unikatowych wyników, ich rzeczowej, naukowej interpretacji oraz dobrego zrozumiałego opisu.

Dane naukometryczne udowadniają liczbowo, że Kandydatka jest aktywnym publikacyjnie naukowcem, a Jej prace są wysokiej jakości. Wskazuje to niezaprzeczalnie na umiejętność prezentacji uzyskanych wyników, która znakomicie rozwinęła się po uzyskaniu stopnia naukowego doktora w roku 2005 (po uzyskaniu ostatniego awansu naukowego).

#### **4.3 Informacja o liczbie publikacji naukowych, monografii, rozdziałów w monografiach autorstwa lub współautorstwa Kandydatki, z podaniem również danych informacji po uzyskaniu ostatniego awansu naukowego**

Liczba publikacji w czasopismach uwzględnionych w bazie JCR: **17** (w tym jedna przed uzyskaniem awansu naukowego).

Liczba publikacje w czasopismach naukowych nie objętych wykazem MNiSW: **1** (przed uzyskaniem awansu naukowego).

Rozdziały w monografiach: **2** (zero przed uzyskaniem awansu naukowego).

Liczba pełno-tekstowych, recenzowane prac konferencyjnych: **3** (w tym 2 przed uzyskaniem awansu naukowego).

Łącznie Kandydatka legitymuje się dorobkiem 23 prac naukowych, z czego 4 wykonała przed ostatnim awansem naukowym.

#### **4.4 Informacja o najważniejszych czasopismach, w ramach których Kandydatka publikowała swoje prace naukowe**

Prace Kandydatki zostały opublikowane w jedenastu różnych czasopismach z rygorystycznym systemem recenzji merytorycznych oraz językowo-edycyjnych, o światowym zasięgu i międzynarodowej rozpoznawalności. Należą do nich: (1) Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, (2) Biophysical Chemistry, (3) Materials Science and Engineering C, (4) Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology, (5) Chemistry and Physics of Lipids, (6) Journal of Agricultural and Food Chemistry, (7) Central European Journal of Physics, (8) Food Chemistry, (9) Optical Materials, (10) European Food Research and Technology, (11) Journal of Luminescence Molecules. Na szczególną uwagę zasługuje

czasopismo Journal of Agricultural and Food Chemistry, w którym Kandydatka opublikowała artykuł w roku 2012. Znajduje się ono na światowym szczycie czasopism z dziedziny nauk o żywności. Świadczy o tym wysoki, wzrastający każdego roku IF tego czasopisma oraz wysoka punktacja MNiSW.

#### **4.5 Informacja, czy Kandydatka odgrywała wiodącą rolę w ramach powstawania współautorskich prac naukowych**

W pracach opublikowanych przez Kandydatkę wielokrotnie jest Ona pierwszym autorem oraz/lub autorem korespondencyjnym. W cyklu prac tworzących osiągnięcie naukowe Kandydatka jest pierwszym autorem w każdej z nich. Kandydatka była odpowiedzialna za udział w wykonaniu i opracowaniu wyników doświadczeń, interpretacji wyników, sformułowaniu wniosków. Kandydatka miała wiodący udział w przygotowaniu manuskryptu, co w mojej ocenie jest najtrudniejszym etapem przygotowania solidnego i przejrzystego raportu z prowadzonych badań. Kandydatka była autorem korespondencyjnym tylko w jednej z prac cyklu habilitacyjnego (praca 1.4). Nie jest oczywiste kto z autorów odpowiadał na pytania i uwagi kierowane przez recenzentów, ale nie w kontekście wymiany korespondencji, która może być mniej istotna, ale w kontekście nanoszenia zmian, wprowadzania poprawek i realizacji uwag recenzentów. Ponieważ Kandydatka miała wiodący udział w przygotowaniu manuskryptu, uważam, że to Ona była osobą odpowiedzialną merytorycznie za treść wszelkich korekt mających na celu udoskonalenie i w konsekwencji opublikowanie danego raportu. Udział Kandydatki w każdym z elementów powstawania pracy, to jest opracowanie koncepcji badań, prowadzenie eksperymentu, przetwarzanie danych eksperymentalnych, a następnie interpretacja uzyskanych wyników wskazuje na wiodący udział Kandydatki w przygotowaniu tych publikacji od początku (pomysł na badania) do końca (opublikowanie uzyskanych wyników). Autorka nie zawarła w przedstawionej do oceny dokumentacji znaczenia swojej roli w postawieniu pytania badawczego, czy przegładzie literatury z zakresu pracy. Nie ma też informacji na temat oceny niepewności, a tym samym rzetelności wyników uzyskanych w przedstawionych pracach.

Jest sprawą niezaprzeczalną, że Kandydatka **odgrywała wiodącą rolę** w realizacji prac tworzących cykl osiągnięcia naukowego.

#### **4.6 Ocena wskazanego przez kandydata osiągnięcia naukowego, w tym, czy stanowi ono znaczny wkład w rozwój określonej dyscypliny naukowej**

W przedstawionym do oceny osiągnięciu naukowym zbadano i opisano właściwości fizykochemiczne wybranych pochodnych tj. glikozydów i estrów tokoferolu. Osiągnięcie składa się z sześciu elementów oznaczonych numerami od 1 do 6. Elementy 1- 4 są ze sobą dobrze, logicznie powiązane, element 5 i 6 są nieco bardziej odległe od poprzednich elementów. Nie można mówić o całkowitym braku powiązania, ale rozdzielony układ glikozydów i estrów jest nieco zaskakujący.

Element oznaczony **numerem pierwszym** przedstawia relację pomiędzy cząsteczką  $\alpha$ -tokoferolu a grupą cukrową połączoną z  $\alpha$ -tokoferolem poprzez wiązanie glikozydowe wytworzone z grupą hydroksylową pierścienia aromatycznego  $\alpha$ -tokoferolu. Omówiono rozkład ładunku elektronowego i wzajemne oddziaływania elektronów z pierścienia cukrowego oraz pierścienia chromanolu. W oparciu o dane spektralne ustalono zależność energii elektronowej glikozydu od rodzaju grupy cukrowej. Stwierdzono, że to grupa

glikozydowa, a nie rodzaj podstawnika w pierścieniu w pozycji 2a wpływa w głównej mierze na rozkład ładunku elektronowego w pierścieniu chromanolowym. Przedstawione informacje mają charakter jakościowy. Wpływ elektronów podstawnika na elektrony głównej części glikozydu (części tokoferolowej) jest dosyć oczywisty, ale bardzo ciekawy i nieco zaskakujący jest wynik a w konsekwencji wniosek, że to właśnie grupa cukrowa, mimo że powiązana z pierścieniem wiązaniem glikozydowym, a więc pośrednio poprzez tlen, a nie bezpośrednio przyłączony do grupy chromanolowej podstawnik w pozycji 2a, wykazuje większy wpływ na rozkład ładunku elektronowego całej cząsteczki glikozydu.

Zmieniony rozkład gęstości elektronowej w glikozydach w porównaniu do cząsteczki wyjściowego tokoferolu objawia się zwiększonym czasem życia fluorescencji w przypadku glikozydów, co tłumaczone jest zwiększonym udziałem relaksacji radiacyjnej w porównaniu do innych procesów relaksacyjnych np. relaksacji cieplnej. W podsumowaniu wskazano na niespecyficzne oddziaływania pierścienia cukrowego z pierścieniem chromanolowym. Jest to dosyć ogólne stwierdzenie i należałoby przynajmniej zasugerować, jakie rodzaje oddziaływań mogą i powinny być brane pod uwagę.

W **drugim elemencie** osiągnięcia naukowego zaprezentowane są wzajemne oddziaływania pochodnej  $\alpha$ -tokoferolu ze środowiskiem, w którym znajduje się ta pochodna. Ten fragment osiągnięcia mówi o możliwości badania właściwości środowiska, w którym znajduje się pochodna cukrowa tokoferolu w oparciu o zarejestrowane dane widmowe pochodnej. Wiadomo, że odpowiedź fluorescencyjna jest wrażliwa na zmiany środowiska w którym przebywa fluorofor. Wiadomo, że można wnioskować na temat struktury przestrzennej różnych substancji (np. białka) czy oddziaływań międzycząsteczkowych, na podstawie zależności danych spektralnych widm fluorescencyjnych badanej cząsteczki od czynników środowiska takich jak pH, temperatura, czy lepkość. W opracowaniu Kandydatka podjęła się odwrotnego zadania tzn. wyznaczenia parametrów środowiska, w oparciu o dane uzyskane z widm fluorescencyjnych substancji znajdującej się w danym środowisku. Ustaliła, że przesunięcie Stokesa oraz natężenie fluorescencji glikozydu są powiązane z polaryzowalnością rozpuszczalnika, którą można w ten sposób ocenić. Wielkość natężenia fluorescencji substancji rozpuszczonej może być również zastosowana do oceny lepkości rozpuszczalnika, przy czym taka ocena ma zastosowanie tylko dla rozpuszczalników, dla których wartość lepkości jest wyższa niż  $\eta = 20$  cP).

W dalszej kolejności w **elemencie trzecim** osiągnięcia naukowego omówiono interakcje dwóch rodzajów modelowej membrany lipidowej tj. membrany zbudowanej tylko z nasyconych kwasów tłuszczowych oraz membrany zbudowanej z nasyconych i nienasyconych kwasów tłuszczowych, z cząsteczkami cukrowych pochodnych  $\alpha$ -tokoferolu, ze szczególnym uwzględnieniem miejsca lokalizacji cząsteczki pochodnej tokoferolu w membranie. Zasygnalizowano również analizę mechanizmów oddziaływania membrana – pochodna tokoferolu.

Obok fluorescencyjnych danych spektralnych wykonano obliczenia kwantowo-mechaniczne, a wnioski uzupełniono o wyniki pomiarów anizotropii fluorescencji. Na podstawie porównania wartości położenia maksimum pasm absorpcji i emisji oraz czasów życia fluorescencji pochodnych cukrowych tokoferolu, w obu badanych membranach oraz w metanolu ustalono, że cząsteczki cukrowej pochodnej tokoferolu lokują się w miejscach membrany charakteryzujących się niską lepkością oraz średnią wartością stałej dielektrycznej (nie sprecyzowano zakresu wartości stałej dielektrycznej). Wartości anizotropii fluorescencji, mierzonej dla różnych pochodnych cukrowych tokoferolu i samego tokoferolu, są takie same

lub bardzo podobna w przypadku obu rodzajów membrany. Wskazuje to na fakt lokowania się pochodnych cukrowych tokoferolu w tym samym regionie membrany co tokoferol, w przypadku obu użytych w doświadczeniu membran. Ustalono w ten sposób, że część cukrowa glikozydu nie wpływa na oddziaływania części tokoferolowej glikozydu z błoną. Potwierdzono ten fakt wartościami obliczonych współczynników podziału.

Ten fragment osiągnięcia potwierdza również lokalizację części chromanolowej glikozydu wewnątrz hydrofilowej części błony, podczas gdy część cukrowa pochodnej pozostaje ponad powierzchnią membrany. Fakt ten wytłumaczono znacznym oddziaływaniem elektrostatycznym hydrofilowej grupy cukrowej z otaczającymi cząsteczkami wody, co skutkuje brakiem pełnej penetracji hydrofobowego rdzenia membrany przez glikozyd. Nie zdefiniowano ani jakościowo ani ilościowo „znaczących oddziaływań”. Lokalizacja pochodnych cukrowych tokoferolu w błonie została dobrze wyjaśniona, ale pewien niedosyt wzbudza brak przedstawienia jasnego, sygnalizowanego w tytule tego elementu osiągnięcia, mechanizmu oddziaływania. Wspomniano wprawdzie o niespecyficznym interakcjach między elektrycznym dipolem pierścienia chromanolu glikozydu a dodatnio naładowaną częścią choliny znajdującą się w hydrofilowym regionie błony, ale nie wspomniano chociażby o oddziaływaniach pochodna – membrana w części hydrofobowej membrany (np. oddziaływania dyspersyjne Londona czy Van der Waalsa, choć same oddziaływania dyspersyjne wspomniane są w podsumowaniu na stronie 24 autoreferatu). Nie obliczono ładunków formalnych na poszczególnych atomach pochodnej tokoferolu tj.  $\alpha$ -Toc  $\beta$ -glikozydu przedstawionego na Fig. 3 w pracy O2. Jest to dosyć dziwne, gdyż dla zoptymalizowanej struktury przedstawionej na wspomnianym rysunku przypisanie ładunków formalnych wydaje się być dosyć prostym zabiegiem w obliczeniach kwantowo mechanicznych. Ładunki mogłyby ułatwić rozpatrzenie występujących oddziaływań w kontekście ilościowym.

W tytule **elementu czwartego** osiągnięcia naukowego zasygnalizowane jest omówienie mechanizmów procesów zachodzących na granicy faz woda powietrze i powietrze ciało stałe jak również mechanizmów molekularnych związanych z tymi procesami. Jest to bardzo ciekawy z naukowego punktu widzenia fragment obrazujący jakościowo wpływ dodatku pochodnej cukrowej tokoferolu na właściwości monowarstwy wytworzonej na powierzchni membrany DPPC, w tym jej przepuszczalność. Przy pomocy różnych metod analitycznych takich jak mikroskopia Brewstera (BAM) czy mikroskopia sił atomowych (AFM) wykazano całkowitą mieszalność pochodnej cukrowej tokoferolu z DPPC w zakresie ułamka molowego mniejszego od 0.3 i pod ciśnieniem mniejszym niż  $35 \cdot 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ . Udowodniono większe upakowanie i większą stabilność monowarstwy utworzonej przez  $\beta$ -glikozyd w porównaniu z tą utworzoną przez cząsteczki  $\alpha$  - tokoferolu, mimo obecności w cząsteczce pochodnej grupy cukrowej. Wskazano jednak na mniejszą stabilność monowarstwy z dodatkiem  $\beta$ -glikozydu niż bez jego udziału. Wnioski wyciągnięto w oparciu o uzyskane wielkości powierzchni nadmiarowej oraz dane termodynamiczne. Wyniki dotyczą organizacji molekuł w monowarstwach oraz mieszalności składników w zależności od wielkości ułamka molowego oraz ciśnienia powierzchniowego. Ciśnienie w którym prowadzono pomiary było z zakresu ciśnienia występującego w błonach biologicznych  $30\text{-}35 \cdot 10^{-3} \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ .

Bardzo ciekawe wyniki jakościowe nie odzwierciedlają jednak tytułu tego elementu osiągnięcia naukowego. Nie zauważam tutaj jasnego opisu mechanizmów zachodzących procesów, a raczej ciekawe jakościowe omówienie tych procesów. Również podkreślana w tytule elementu czwartego geometria molekuł biorących udział w procesach mieszania i

wzajemnego oddziaływania nie jest uwypuklona. W związku z powyższym uważam, że tytuł tego elementu nie jest właściwie przedstawiony.

**Element piąty** osiągnięcia naukowego dotyczy stabilności wybranych estrowych pochodnych  $\alpha$ -tokoferolu (malonian, bursztynian, monomalonian oraz nikotynian) w obecności promieniowania UVA oraz UVB w układach homo i heterogenicznych. Zgodnie z oczekiwaniami, podobnie jak w przypadku pochodnych glikozydowych parametry spektralne (absorpcja, emisja, czas życia) generowane przez estrы tokoferolu są inne niż analogiczne parametry zarejestrowane dla samego tokoferolu. Promieniowanie z zakresu UVA nie wpłynęło znacząco na zmiany parametrów spektralnych, przy czym nie zdefiniowano pojęcia znacząco. Jest to arbitralne podejście ilościowe, które mogłoby być odniesione na przykład do wielkości niepewności pomiarów danego parametru. Wsparte wynikami HPLC wnioski wskazują na fotodegradację estrów, przy czym sugerowany jest wieloetapowy, a nie jednoetapowy rozpad do związków takich jak tokoferol czy chinon. Szczegółowa informacja potwierdzająca pojawianie się związków pośrednich nie jest klarownie zaprezentowana, wniosek jest wyciągnięty w oparciu o występowanie punktów izosbestycznych w widmach estrów. Charakter protyczny i niejednorodność środowiska w którym znajdują się estrы, wpływa spowalniająco na proces ich degradacji pod wpływem światła.

Kolejny **szósty element** osiągnięcia naukowego dotyczy badania wpływu szczawianu  $\alpha$ -tokoferolu na parametry fizyczne membrany lipidowej w układach modelowych liposomach DPPC. Szczegółowo opisano zastosowanie techniki DSC do badania właściwości membrany. Wykazano, że badany szczawian powoduje dużo większe zmiany w strukturze membrany w porównaniu do zmian spowodowanych obecnością jedynie tokoferolu. Zasugerowano, że szczawian głównie ze względu na swoje rozmiary i zajmowana większą objętość powoduje większe strukturalne zmiany w obszarze polarnych głów fosfolipidowych cząsteczek tworzących membranę. Zmiany w strefie hydrofilowej membrany spowodowane działaniem grupy szczawianowej wpływają na zwiększoną możliwość penetracji membrany przez cząsteczki wody, w tym również w obrębie niepolarnego łańcucha węglowego, zmniejszając w ten sposób oddziaływania van der Waalsa, co w rezultacie zwiększa grubość dwuwarstwy membrany. Wyniki przedstawione w elemencie szóstym dobrze komponują się z wynikami z elementu trzeciego, dlatego wydaje się wskazane połączenie tych elementów.

## Podsumowanie

Składowe osiągnięcia oznaczone przez Kandydatkę 1-4 stanowią logiczne połączenie i konsekwentne wyjaśnianie zjawiska, przy czym element 4 jest niewłaściwie zatytułowany. Elementy oznaczone jako 5 i 6 stanowią nieco oddzielny fragment, aczkolwiek można je powiązać z poprzednimi, chociażby poprzez obecność we wszystkich elementach cząsteczki  $\alpha$ -tokoferolu. Można rozważyć powiązanie tematyczne pomiędzy tymi elementami, ale to powiązanie jest dosyć luźne. Element 6 na przykład, mógłby być połączony z elementem 3 stanowiąc opis oddziaływania czy interakcji różnych pochodnych  $\alpha$ -tokoferolu (estrów i glikozydów) z membraną lipidową. Punkty 5 i 6 stanowią pewne zakłócenie logicznego ciągu prac przedstawionych w ramach ocenianego osiągnięcia, nie umniejszając jednak jego całościowej wartości merytorycznej.

Oceniane osiągnięcie zawiera zarówno mocne jak i słabe strony, przy czym mocne strony mają dużo większe znaczenie i moc niż strony słabe.

### **Mocne strony osiągnięcia**

Przedstawiając osiągnięcie naukowe Kandydatka wskazała na lokalizację glikozydów tokoferolu w błonie komórkowej, ustalając położenie cząsteczki w części hydrofilowej membrany oraz wystawanie części cukrowej ponad powierzchnię membrany. Kandydatka dosyć jasno przedstawia poprzez wyniki swoich pomiarów tj. głównie parametry spektralne, ale również obliczenia kwantowo mechaniczne, lokalizację pochodnych tokoferolu w membranie, rozstrzygając dyskusje i różne stanowiska prezentowane w literaturze, jak również wskazując na różnice lokalizacyjne występujące pomiędzy tokoferolem i jego cukrowymi pochodnymi.

Kandydatka wskazuje w jaki sposób, na poziomie molekularnym, można wykorzystać dane spektralne (nie właściwości spektroskopowe czy spektralne) do oceny parametrów otoczenia (środowiska), takich jak polarność, czy lepkość, w którym znajduje się tokoferol i jego pochodne.

Kandydatka ustala stabilność pochodnych estrowych  $\alpha$ -tokoferolu w obecności promieniowania UV/VIS i pokazuje wpływ najbardziej destrukcyjnego z estrów (szczawianu) na modelową membranę.

### **Słabsze strony osiągnięcia**

Estry i glikozydy – łączy je wprowadzie tokoferol, ale ciekawsze byłoby zbadanie i powiązanie właściwości foto rozpadu glikozydów, a nie tylko estrów, co stanowiłoby naturalną kontynuację elementów 1 - 4 osiągnięcia. Kandydatka napisała jednak w autoreferacie, że uzyskała takie dane, ale są to dane niepublikowane, co usprawiedliwia takie a nie inne podejście.

Wpływ przyłączenia cząsteczki glikozydu czy kwasu karboksylowego na zmianę rozkładu gęstości elektronowej w cząsteczce tokoferolu jest dosyć oczywisty. Ujęcie bardziej ilościowe niż jakościowe stanowiłoby lepsze osiągnięcie.

Mechanizm oddziaływania błona – pochodna tokoferolu. W pracy O2 Kandydatka wskazuje na rolę azotu z grupy cholinowej oraz reszty cukrowej, ale nie rozwija tego ciekawego zagadnienia.

Podsumowując należy podkreślić, że wszystkie elementy ocenianego osiągnięcia są szczegółowo przedstawione w artykułach naukowych opublikowanych w czasopismach o zasięgu międzynarodowym. Przechodziły restrykcyjne recenzje niezależnych ekspertów wybieranych przez redaktorów danego czasopisma. Posiadają więc niezaprzeczalnie wysoką wartość naukową i stanowią duży wkład w rozwój takiej dziedziny naukowej jak metody spektroskopowe oraz chemia interakcji (np. pomiędzy szeroko pojętym rozpuszczalnikiem, a substancją rozpuszczoną).

Omówienie odporności estrów  $\alpha$  tokoferolu na działania promieniowania UV (fotostabilność) stanowi solidną podstawę do prac mających na celu zastosowanie praktyczne estrów. Również lokalizacja glikozydów w błonie lipidowej wskazuje kierunek dalszych prac związanych z takimi pochodnymi. Wyjaśnienie interakcji chemicznych ze środowiskiem stwarza możliwość oceny takiej interakcji w oparciu o właściwości związków chemicznych decydujących o parametrach spektralnych rejestrowanych w ich widmach. Niezaprzeczalnym elementem rozwoju i wpływu na rozwój badań w ramach nauk rolniczych i leśnych jest bogate przedstawienie możliwości analityczno-poznawczych fluorescencji.



#### 4.7 Informacja o spełnieniu przez kandydata kryterium dotyczącego wykazania się istotną aktywnością naukową lub artystyczną

Obok przedstawionego do oceny cyklu artykułów tworzących osiągnięcie naukowe, Kandydatka wykazuje dużą aktywność naukową, tzw. aktywność około-habilitacyjną udokumentowana poprzez opublikowane artykuły nie zawarte w cyklu habilitacyjnym. Łączna suma punktów zgromadzonych przez Kandydatkę do tej pory to 598, a łączny IF to prawie 41. Kandydatka prowadzi lub prowadziła współpracę z wieloma ośrodkami naukowymi w Polsce. Była zatrudniona w różnych jednostkach podczas swojej kariery naukowej. Wskazuje to na Jej dużą aktywność naukową. We współpracy z innymi ośrodkami w Polsce podejmowała i podejmuje tematykę naukową związaną początkowo z naturalnymi antyoksydantami ogólnie, a później bardziej szczegółowo z badaniem właściwości tokoferolu i jego pochodnych. W pracy wykorzystuje bardzo dobrze poznaną metodę fluorescencji, wykorzystując uzyskane dane spektralne takie jak czas życia, intensywność absorpcji oraz emisji, zarejestrowane w postaci widm, do opisu właściwości fizycznych, chemicznych i biologicznych różnych składników żywności jak również do wzajemnych oddziaływań ciał biologicznych. Nie unika też interpretacji wyników uzyskanych przy pomocy innych metod pomiarowych, można tu wymienić mikroskopię Brewstera i AFM oraz technikę DSC czy obliczenia kwantowo mechaniczne.

Wspomniane wcześniej ośrodki naukowe z którymi współpracuje Kandydatka to Uniwersytet w Białymstoku, Politechnika Poznańska, Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu Polskiej Akademii Nauk w Poznaniu czy Uniwersytet Jagielloński. Z zagranicznych ośrodków można wymienić Instytut Ogrodnictwa Łotewskiego Uniwersytetu Rolniczego) w Dobele, Łotwa.

Prowadząc prace dotyczące głównie pochodnych tj. estrów, glikozydów i karbamidów tokoferoli, Kandydatka była wykonawcą projektu badawczego finansowanego przez KBN o numerze N N312 1410 33 pt. „Mechanizmy synergicznego oddziaływania pomiędzy D- $\alpha$ -tokoferolem, kwasami fenolowymi i flawonoidami w emulsjach i liposomach”. Następnie kierowała projektem naukowym w ramach badań własnych WNoŻiŻ UP w Poznaniu nr 312/TŻ/82W pt. „Badanie własności antyutleniających glikozydowych pochodnych dl- $\alpha$ -tokoferolu w membranach lipidowych”. W dalszej kolejności uczestniczyła w międzyuczelnianym projekcie badawczym nr 12/782/WI/10 pt. „Przeciwutleniające właściwości tokoferoli immobilizowanych w lipidowych monowarstwach Langmuira i Langmuira-Blodgett”. Następnie pozyskała dofinansowanie z dotacji celowej nr 507.782.17 na zadania służące rozwojowi młodych naukowców WNoŻiŻ UP w Poznaniu, co umożliwiło Jej kontynuację dotychczasowych prac skupiających się na studiowaniu oddziaływań pochodnych  $\alpha$ -tokoferolu z membranami lipidowymi. Kandydatka bada właściwości i oddziaływania membrana – związek chemicznych różnych pochodne tokoferolu, mając w dorobku całą ich gamę. Wyniki prezentuje na konferencjach naukowych oraz w postaci artykułów naukowych wymienionych w ramach osiągnięcia naukowego oraz poza nim.

Obok podstawowej tematyki badawczej, tj. tokoferolu i jego pochodnych, Kandydatka brała udział w pracach dotyczących tworzenia kompleksów przez pochodzące z kawy kwasy chlorogenowy i kawowy, z  $\beta$ -cyklodekstryną. Zajmowała się też wzajemnym oddziaływaniem pomiędzy fosfatydylocholinową membraną lipidową a składnikami hydrolizowanych i niehydrolizowanych preparatów sojowych zawierających izoflawony oraz genisteiny i daidzeiny. Niektóre naukowe aktywności Kandydatki dotyczyły oddziaływań pomiędzy białkami o aktywności enzymatycznej a związkami fenolowymi pochodzącymi z nasion łubinu.

Wyniki prac prowadzonych przez Kandydatkę były prezentowane na wielu konferencjach, zjazdach i kongresach. Podjęta tematyka naukowa jest szeroka, a jednocześnie połączona wysoko specjalizacyjną techniką pomiarową tj. fluorescencją. Wymienione informacje potwierdzają istotną aktywność naukową Kandydatki, a co za tym idzie zapewniają o spełnianiu przez Kandydatkę kryterium oceny, które dotyczy istotnej aktywności naukowej.

#### **4.8 Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych i popularyzujących naukę kandydata do stopnia doktora habilitowanego**

Kandydatka pracując w zatrudniających ją ośrodkach naukowych prowadziła i prowadzi działalność dydaktyczną. Ponieważ Jej wykształcenie magisterskie to fizyka, prowadziła zajęcia z tego przedmiotu będąc kierownikiem przedmiotu dla różnych kierunków studiów stacjonarnych, takich jak Inżynieria Środowiska (w latach 2010/2011 – 2019/2020), Inżynieria i Gospodarka Wodna (w latach 2013/2014 – 2018/2019), Geotechnologie, hydrotechnika, transport wodny (2019/2020). Kandydatka kierowała również zajęciami z fizyki dla kierunków niestacjonarnych: Technika Rolnicza i Leśna (2009/2010 – 2010/2011), Ekoenergetyka (2011/2012 – 2013/2014), Inżynieria Rolnicza (2014/2015 – 2016/2017), Ogrodnictwo (2017/2018), Technologia żywności i żywienie człowieka (2017/2018–2019/2020). Na zajęcia prowadzone od 2006 roku składało się łącznie 636 godzin wykładów, co daje średnio 45 godzin wykładów w jednym roku akademickim. Kandydatka wypracowała średnio 65 nadgodzin dydaktycznych w każdym roku akademickim, licząc również od roku 2006. Dane wskazują na duże zaangażowanie Kandydatki w działalność dydaktyczną, realizowaną na studiach stacjonarnych i niestacjonarnych.

Kandydatka brała czynny udział w przygotowywaniu i modernizacji ćwiczeń laboratoryjnych dla studentów, wliczając w to przygotowanie techniczne oraz opracowywanie i uaktualnianie instrukcji oraz protokołów poszczególnych ćwiczeń. Jednym z samodzielnych działań Kandydatki było opracowanie przebiegu ćwiczenia i wstępu teoretycznego, jak również zaprojektowanie i przygotowanie stanowiska pomiarowego do: (a) wyznaczania ogniskowych soczewek skupiających i rozpraszających ze wzoru soczewkowego oraz metodą Bessela, b) wyznaczania stężenia białka metodą refraktometryczną.

W ramach doskonalenia procesu dydaktycznego Kandydatka przygotowała przeznaczoną dla studentów ankietę oceny zajęć dydaktycznych. Ankieta służyła do oceny realizacji procesu kształcenia w trakcie ćwiczeń laboratoryjnych z fizyki i biofizyki. Na podstawie wypełnianych przez studentów ankiet, corocznie opracowywane i analizowane są wyniki mające na celu polepszenie jakości prowadzonego procesu dydaktycznego. Kandydatka brała udział w następujących programach związanych z dydaktyką:

1. „Zintegrowany Program Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu na rzecz Innowacyjnej Wielkopolski” (POWR.03.05.00-00-ZR42/18) dofinansowanego ze środków Unii Europejskiej w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój 2014-2020
2. "PKD - Program Podnoszenia Kompetencji Dydaktycznych Kadry Uczelni" prowadzonego w ramach projektu "Najlepsi z natury! Zintegrowany Program Rozwoju Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu" (POWR.03.05.00-00-Z218/17) w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój.

Przedstawione osiągnięcia dydaktyczne są obszerne i w pełni wystarczające do pozytywnej oceny Kandydatki. Zastrzeżeniem, które nasuwa się jest brak udziału Kandydatki w nauczaniu w dowolnym języku obcym (najlepiej angielskim), brak uczestnictwa w programach międzynarodowych wymian dla nauczycieli akademickich, takich jak na przykład Erasmus czy wcześniej Socrates. Jednakże, nie jest to zastrzeżenie krytyczne, ocena aktywności dydaktycznej Kandydatki jest wysoce pozytywna.

Działalność organizacyjna Kandydatki nie jest bardzo bogata, co wskazuje i potwierdza, że skupia się Ona zdecydowanie na nauce. Mimo dużego zaangażowania naukowego oraz dydaktycznego potrafiła znaleźć czas na:

1. Sprawowanie opieki organizacyjnej nad laboratorium biofizyki molekularnej w szczególności nad układem do pomiarów czasów życia metodą zliczania pojedynczych fotonów (TCSP).
2. Bycie członkiem Rady Katedry Fizyki i Biofizyki UP z ramienia związku zawodowego „Solidarność”.
3. Działalność jako członek Komisji ds. parametryzacji Wydziału Nauk o Żywności i Żywieniu Uniwersytetu Przyrodniczego w Poznaniu.
4. Aktywność w Uczelnianej Komisji Wyborczej.
5. Członkostwo (skarbnik oddziału poznańskiego) Polskiego Towarzystwa Biofizycznego.

Wśród wielu osiągnięć naukowych Kandydatki (artykuły naukowe, udział w konferencjach) można wskazać na Jej dodatkowe działania *pro publico bono* popularyzujące naukę.

Brała Ona udział w organizacji I i II Edycji Nocy Naukowców organizowanych przez Uniwersytet Przyrodniczy w Poznaniu, uczestnicząc w przygotowaniu i pokazach eksperymentów fizycznych pt. „Współczesny kotoczarownic, czyli kuchenka mikrofalowa w/od kuchni”. Oraz „Makijaż natury, czyli pejzaże światłem malowane”. Brała udział w pokazach doświadczeń fizycznych podczas XIV Poznańskiego Festiwalu Nauki i Sztuki. Nawiązała współpracę z fundacją Uniwersytet Dzieci przy oddziale Poznańskim, prowadząc tam zajęcia warsztatowe dla podopiecznych Fundacji w zakresie „Tematy” pt. „Jak powstaje białe światło LED”. W ramach działania „Uniwersytetu Młodych Przyrodników” Kandydatka brała udział w prowadzeniu pozaszkolnych zajęć edukacyjnych pt. „Fizyka na co dzień”. Zajęcia prowadzone były w Katedrze Fizyki i Biofizyki, a program współprojektowany był przez Unię Europejską w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój 2014-2020, ze środków Europejskiego Funduszu Społecznego. Kandydatka kontynuuje nieprzerwanie swoją działalność popularyzującą naukę od początku swojej kariery naukowej.

## 5. Inne uwagi

Zapoznając się z autoreferatem Kandydatki zwróciłem uwagę na pewne błędy językowe, które mogą implikować niezrozumienie lub brak jednoznaczności. Dotyczy to używania pewnych terminów, które są wprowadzone w użyciu i są dosyć popularne, ale w opracowaniach naukowych powinno się używać terminów poprawnych. Należy też wymienić tzw. literówki, a to dlatego, że jest ich zdecydowanie za dużo, a w kilku miejscach mogą zmienić sens zdania. Również niektóre konstrukcje zdań są nieprawidłowe. Szczegóły podaję poniżej.

### Wątpliwe terminy

1. „Właściwości spektroskopowe/spektralne”. Chodzi tu o parametry rejestrowane w widmie. Związek chemiczny sam w sobie nie ma właściwości spektralnych. Ma właściwości chemiczne i fizyczne, które generują odpowiednie sygnały spektralne.
2. „Modyfikacja grupy” np. hydroksylowej. Modyfikacja to według słownika PWN: „Częściowa zmiana czegoś nienaruszająca istoty rzeczy” też: rzecz zmieniona w taki sposób” lub „zmiana cechy organizmu wywołana czynnikami środowiskowymi”. Estryfikacja grupy hydroksylowej, lub też wytworzenie wiązania glikozydowego, zdecydowanie zmienia istotę rzeczy. Powstaje wówczas wiązanie estrowe lub glikozydowe.
3. „Zawartości nienasylenia” łańcuchów acylowych. Chodzi o stopień nienasylenia łańcucha węglowego.
4. „Dynamika błony” – nie wiem co Autorka miała na myśli.
5. „rodzaj ugrupowania estrowego”. Nie ma rodzaju wiązania estrowego. Jest jedno takie wiązanie.
6. „Grupa glikozydowa”. Nie spotkałem się z takim określeniem. Mówi się o grupie estrowej ale nie o glikozydowej.
7. „Koncentracja”. Chodzi o stężenie. To słowo powinno być używane w odniesieniu do zawartości substancji rozpuszczonej w roztworze. Kalka z języka angielskiego jest bardzo niewłaściwa.
8. „natura” dołączonej do pierścienia fenolowego grupy. Należy użyć sformułowania „struktura” lub „właściwości chemiczne”.
9. Powinno używać się konsekwentnie jednostek układu SI.

### Konstrukcje zdań

Wiązanie nie jest „na wodorze”. Jest pomiędzy atomem wodoru a atomem innego pierwiastka.

Na stronie 8 w akapicie 2 w zdaniu 1 i 2 Autorka mówi o alfa tokoferolu. W kolejnym zdaniu mówi o „jej” właściwościach mając na myśli prawdopodobnie witaminę E. Ponieważ odnosi się do podmiotu domyślnego powinna albo użyć nazwy „witamina E” w zdaniu 2 albo w zdaniu 3 używać formy męskoosobowej „jego”.

Str. 24 koniec drugiego akapitu lekkość zamiast lepkość

Str. 24 punkt 4 interakcje momentu dipolowego chromanolu z atomem azotu choliny. Moment dipolowy nie jest wielkością fizyczną oddziałującą ładunki.

Str. 25 trzeci punkt od dołu – „nawet dla niskich jego koncentracjach” powinno być „nawet dla niskich stężeń szczawianu a-tokoferolu” lub „nawet dla niskich jego stężeń”.

Str. 25 drugie zdanie od dołu. Przede wszystkim, zasadniczo..... Taka konstrukcja jest dosyć dziwna.

Str. 26 zdanie 5 od góry. Grupa estrowa czy glikozydowa nie są dołączone. One są wytworzone.

Str. 26 Zdanie 2. Jakie zjawiska Autorka ma na myśli? Czy zjawiska to mechanizm oddziaływania, czy samo oddziaływanie? Jakie „specyficzne” oddziaływania Autorka ma na myśli? Czym są oddziaływania w obrębie samej cząsteczki? Zdanie kończące autoreferat jest bardzo nieczytelne i nie może być potraktowane jako konkluzja.

## **Wniosek końcowy**

Po dokonaniu oceny przedstawionego przez dr inż. Grażynę Neunert osiągnięcia naukowego pt. „Charakterystyka wybranych pochodnych  $\alpha$ -tokoferolu w układach homo- i heterogenicznych”, jak również całokształtu Jej dorobku naukowego, dorobku dydaktycznego i organizacyjnego oraz dorobku we wszystkich innych obszarach stwierdzam, że dr inż. Grażyna Neunert spełniana wymogi określone w Ustawie z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.).

Szczególną uwagę zwracam na fakt że:

- Przedstawione osiągnięcie naukowe opublikowane w formie artykułów naukowych o zasięgu międzynarodowym przedstawia dużą wartość naukową i porusza aktualne zagadnienia i problemy występujące w dyscyplinie technologia żywności i żywienia,
- dodatkowy dorobek tzw. dorobek około-habilitacyjny jest pokaźny i spełnia w pełni wymogi stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego,
- dokonania dydaktyczne i organizacyjne, jak również współpraca z otoczeniem jest bardzo dobra.

**W oparciu o przedstawione powyżej wszystkie fakty popieram wniosek dr inż. Grażyny Neunert o nadanie Jej stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk rolniczych, dyscyplinie technologia żywności i żywienia.**

Prof. dr hab. Piotr Koczoń

