

UNIWERSYTET MEDYCZNY
IM. KAROLA MARCINKOWSKIEGO W POZNANIU
KATEDRA I ZAKŁAD FARMAKOGNOZJI

ul. Rokietnicka 3, 60-781 Poznań
tel. (0-61) 641-83-97

prof. dr hab. Judyta Cielecka-Piontek
jpiontek@ump.edu.pl



Poznań, 15.08.2022

RECENZJA

Rozprawy doktorskiej mgr farm. Agaty Walkowiak-Bródki

zatytułowanej

„Zastosowanie dwuwymiarowej spektroskopii korelacyjnej w zakresie UV-VIS-IR i metod chemometrycznych w analizie produktów leczniczych i spożywczych”

wykonanej

pod kierunkiem dr hab. Bogumiły Kupcewicz, prof. UMK

w Katedrze i Zakładzie Chemii Analitycznej Wydziału Farmaceutycznego

Uniwersytetu Mikołaja Kopernika Collegium Medicum w Bydgoszczy

Zaprezentowana do oceny praca doktorska pt.: „Zastosowanie dwuwymiarowej spektroskopii korelacyjnej w zakresie UV-VIS-IR i metod chemometrycznych w analizie produktów leczniczych i spożywczych” stanowi odpowiedź na pytanie czy jest możliwa wiarygodna analiza jakości produktów leczniczych zawierających związki pochodzenia naturalnego w oparciu o zastosowanie metod spektroskopowych połączonych z rozwinięciami chemometrycznymi.

Na wstępie chciałam zaznaczyć, że praca została przygotowana w sposób wyróżniający, w odniesieniu do dwóch obszarów jej realizacji. Kandydatka budując hipotezę i wybierając metody badawcze zaplanowała zastosowanie różnych technik analitycznych. Co więcej

wszystkie z zastosowanych technik zostały bardzo dobrze zaprezentowane przez Doktorantkę, a procedury badań analitycznych zostały opisane w sposób niezwykle wyczerpujący i jasny. Przedstawione opracowanie prezentuje trzymane wyniki w sposób logiczny oraz realizuje strategię przygotowania do chemometrycznych analiz, co świadczy o bardzo dobrym przygotowaniu Kandydatki do stopnia doktora, także w zakresie przetwarzania pierwotnych danych analitycznych. Drugim z obszarów aktywności naukowej Doktorantki, wartym podkreślenia, jest umiejętność stosowania matematycznych aplikacji do analizy otrzymywania wyników dla grup zmiennych niepowiązanych.

Należy, także podkreślić – trafny wybór – preparatów pochodzenia roślinnego lub roślinnych preparatów leczniczych wybranych jako modelowe do prowadzonych badań zrealizowanych w ramach Doktoratu. Analizy preparatów pochodzenia roślinnego w odniesieniu do złożoności analizowanej matrycy wymagają zawsze znacznych umiejętności analitycznych na etapie przygotowania próbek, jak i wykonania samej analizy, czym wykazała się Doktorantka w trakcie prowadzenia badań i analizy otrzymanych wyników.

Tematyka badawcza zaprezentowana w niniejszym opracowaniu wpisuje się w nurt tzw. zielonej lub zrównoważonej chemii (*ang. green chemistry suitable chemistry*). Zaprezentowane podejście jest niezmiernie ważne w odniesieniu do konieczności poszukiwania „zielonych metod analizy” produktów leczniczych, suplementów diety czy środków spożywczych, warunkujących ich wiarygodną jakość.

Przedstawione do oceny opracowanie zawiera: część teoretyczną obejmującą wstęp i opis stosowanych metod analitycznych i procedur analizy, precyzyjne identyfikowane cele pracy, opis materiałów i zastosowanych metod, prezentację wyników i ich dyskusję oraz podsumowanie i wnioski. Uzupełnieniem do opracowania jest streszczenie w języku polskim i języku angielskim. Dodatkowo, w opracowaniu Kandydatka zamieściła życiorys zawodowy, który pozwala na ocenę ogólnej aktywności naukowej Doktorantki.

Jako załączniki opracowania zostały zestawione publikacje, w których Doktorantka zaprezentowała otrzymane wyniki badań, dotyczące oznaczeń spektrofotometrycznych surowca otrzymanego z miłorzębu japońskiego (załączniki A1–A2 oraz B1–B2), farmakoterapii cukrzycy z zastosowaniem morwy białej (zał. C), oraz zasady analizy jakościowej i ilościowej produktów roślinnych opartej na analizie tzw. fingerprint metod (Zał. D). Dla prac eksperymentalnych (Załączniki A i B) przedstawiono oświadczenia współautorów świadczące o znaczącym udziale Doktorantki w koncepcji badań, prowadzeniu prac eksperymentalnych, oraz przygotowaniu manuskryptów.

W części teoretycznej Doktorantka prezentuje zasady zastosowania metod spektroskopowych w analizie złożonych matryc analitycznych. Dalej kolejno opisuje możliwości aplikacji metod spektroskopowych w analizie roślinnych preparatów leczniczych czy analizie surowców roślinnych przy wsparciu chemometrycznych rozwinięć. Doktorantka przedstawia główne idee i potencjał zastosowania dwuwymiarowej spektroskopii korelacyjnej (2D-CoS) dwuśladowej dwuwymiarowej spektroskopii korelacyjnej (2T2D), oraz chemometrycznych metod w zakresie metod uczenia bez nadzoru i z nadzorem.

Cele pracy zostały zaprezentowane w sposób jasny i logiczny, ze wskazaniem modelowych produktów leczniczych – preparatów z wyciągu z liści miłorzębu japońskiego oraz liści morwy białej. Kolejno zdefiniowano etapy badań konieczne do przeprowadzenia, celem osiągnięcia wniosków końcowych obejmujących wyniki prac eksperymentalnych, jak i teoretycznych analiz bazujące na zastosowaniu metod chemometrycznych (PLS i PLS-DA) algorytmów dwuśladowej spektroskopii korelacyjnej oraz wielowymiarowej analizy głównych składowych (MPCA). Dobór materiałów do badań został przeprowadzony w sposób odpowiedni. Zebrane zbiory prób do badań stanowią odpowiednio dobrane matryce w otrzymaniu zmiennych analitycznych.

Opis procedur eksperymentalnych oraz zastosowanych rozwiązań teoretycznych w sposób uporządkowany pozwala czytelnikowi śledzić kolejność kroków badawczych oraz prawidłowość wyciąganych wniosków.

Bardzo dobre wrażenie sprawia dyskusja nad otrzymanymi wynikami. Doktorantka w sposób niezwykle logiczny prezentuje otrzymane wyniki, krytycznie jednocześnie wskazując ograniczenia i słabe strony zastosowanych technik analitycznych. Na szczególne wyróżnienie zasługuje prezentacja wyników rozwiązań teoretycznych. Znacznym wsparciem w prezentacji wyników i dyskusji w tym obszarze są graficzne wizualizacje wyznaczonych zależności. Doktorantka prezentując wyniki otrzymane oddzielnie przeprowadziła analizy dla liści morwy białej i miłorzębu japońskiego. Dla każdej grupy produktów zawierających wybrany surowiec zaprezentowano wyniki analiz chemometrycznych i spektrometrycznych. Charakterystyka surowców z liści miłorzębu japońskiego obejmuje także wyznaczenie ich potencjału antyoksydacyjnego z zastosowaniem techniki DPPH.

Zaprezentowane przez Doktorantkę wnioski zostały odpowiednio wyciągnięte, zwłaszcza w odniesieniu do możliwości/wymagań/ograniczeń zastosowanych metod eksperymentalnych i teoretycznych rozwinięć (iPLS, iPLS-DA, 2T2D-CoS, MPCA). Doktorantka, przygotowane opracowanie, cparia na 135 pozycjach literaturowych, zostały one

dobrane odpowiednio i stanowią dobre studium literaturowe w zakresie prowadzonego profilu badań.

W odniesieniu do wybranych treści poproszę o odniesienie się Doktorantki do dwóch kwestii:

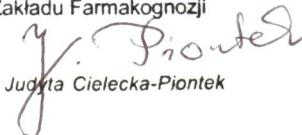
- czy rzeczywiście na polskim rynku farmaceutycznym obserwowany będzie trend rozwoju preparatów jednoskładnikowych produktów roślinnych?
- czy zaprezentowane w pracy opracowania będą mogły znaleźć zastosowanie w analizie roślinnych preparatów leczniczych zawierających różne składniki, a te same związki aktywne?

Podsumowując, przedłożona do oceny rozprawa doktorska mgr farm. Agaty Walkowiak-Bródki odpowiada wszystkim wymaganiom stawianym tego typu opracowaniom na stopień doktora nauk farmaceutycznych. Tym samym wnoszę do Wysokiej Rady Dyscypliny Nauk Farmaceutycznych Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu na Wydziale Farmaceutycznych Collegium Medicum w Bydgoszczy o dopuszczenie Pani mgr. farm. Agaty Walkowiak-Bródki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Zwracam się też z wnioskiem o wyróżnienie niniejszego Doktoratu, mając na uwadze jakość merytoryczną przedstawionych badań analitycznych i teoretycznych oraz wyróżniającą się znacząco formę prezentacji otrzymanych wyników.

Judyta Cielecka-Piontek

Kierownik
Katedry i Zakładu Farmakognozji


prof. dr hab. Judyta Cielecka-Piontek