

## ***Bionieorganiczne ujęcie koordynacji i selektywności jonów metali przejściowych w bakteryjnych systemach transportu i homeostazy***

*Aleksandra Hecel-Czaplicka – wykład przedhabilitacyjny*

Jony metali przejściowych pełnią kluczowe funkcje w organizmach żywych, uczestnicząc w procesach katalitycznych, regulacyjnych i strukturalnych. Dla bakterii zdolność selektywnego pozyskiwania i kontrolowanego transportu tych jonów jest istotnym warunkiem przeżycia i wirulencji, szczególnie w środowisku gospodarza o ograniczonej dostępności metali.

Przedstawione osiągnięcie naukowe koncentruje się na molekularnym zrozumieniu mechanizmów odpowiedzialnych za koordynację, selektywność oraz przekazywanie biologicznie istotnych jonów metali przejściowych, przede wszystkim Zn(II), Ni(II) oraz Cu(I)/Cu(II), w bakteryjnych systemach transportu i homeostazy. Badania zostały osadzone w obszarze chemii bionieorganicznej i oparto je na założeniu, że funkcja biologiczna układów transportowych wynika nie tylko z organizacji całych białek, ale również z lokalnej architektury dynamicznych motywów donorowych.

Wykazałam, że elastyczne motywy bogate w reszty histydylowe stanowią kluczowe motywy selektywnego wychwytu jonów Zn(II) przez bakteryjne systemy transportowe. Scharakteryzowałam mechanizmy wiązania metalu w białkach ZnuA, ZnuD oraz AdcA i pokazałam, że o selektywności transportu decydują organizacja przestrzenna donorów, ich dostępność oraz możliwość dynamicznej reorganizacji struktury [H1-H4].

Następnie sformułowałam uniwersalne zasady biokoordynacyjne opisujące zachowanie motywów polihistydylowych w warunkach fizjologicznych. Badania modelowych układów peptydowych pozwoliły określić zależności między topologią miejsc donorowych, geometrią koordynacji i preferencjami wobec jonów metali, co umożliwiło uogólnienie obserwacji na naturalne białka [H5-H7]. Istotnym elementem badań było także wyjaśnienie mechanizmów różnicowania i transferu jonów Ni(II), Zn(II) oraz Cu(I)/Cu(II) w układach homeostazy metali. Określiłam rolę motywów histydylowych, cysteinyliwych i metionyliwych oraz opracowałam pierwsze podejście do ilościowego opisu kompleksów Cu(I) w warunkach beztlenowych, wykorzystane do analizy biologicznie istotnych układów transportowych i regulatorowych [H8-H15].

Całość badań doprowadziła mnie do sformułowania spójnego modelu opisującego selektywność i kierunkowość transferu jonów metali jako konsekwencję dynamicznej architektury motywów donorowych. Uzyskane wyniki poszerzają wiedzę na temat molekularnych podstaw homeostazy metali u bakterii i wskazują nowe kierunki projektowania strategii przeciwdrobnoustrojowych ukierunkowanych na zaburzenie procesów pozyskiwania niezbędnych pierwiastków.

[H1] **Hecel A.\***, Kola A., Valensin D., Kozłowski H., Rowińska-Żyrek M. *Inorg. Chem.*, **2020**, 59, 1947-1958.

[H2] **Hecel A.\***, Rowińska-Żyrek M., Kozłowski H. *Inorg. Chem.*, **2019**, 58, 5932-5942.

[H3] Garstka K., **Hecel A.\***, Kozłowski H., Domínguez-Martín A., Szewczyk K., Rowińska-Żyrek M. *Dalton Trans*, **2025**, 54, 6795-6804.

[H4] Garstka K., **Hecel A.**, Kozłowski H., Rowińska-Żyrek M. *Metallomics*, **2022**, 14, mfac042/1-mfac042/10.

[H5] **Hecel A.\***, Garstka K., Kozłowski H., Rowińska-Żyrek M. *J. Inorg. Biochem.*, **2024**, 252, 112456/1-112456/14.

[H6] Bellotti D., Leveraro S., **Hecel A.**, Remelli M. *Anal. Biochem.*, **2023**, 680, 115315/1-115315/10.

[H7] **Hecel A.\***, Wątyły J., Rowińska-Żyrek M., Świątek-Kozłowska J., Kozłowski H. *J. Biol. Inorg. Chem.*, **2018**, 23, 81-90.

[H8] **Hecel A.\***, Kola A., Valensin D., Kozłowski H., Rowińska-Żyrek M. *Dalton Trans.*, **2021**, 50, 12635-12647.

[H9] **Hecel A.\***, Kola A., Valensin D., Witkowska D. *Inorg. Chem.*, **2025**, 64, 2936-2950.

[H10] Pakowski M., **Hecel A.\*** *Dalton Trans.*, **2025**, 54, 15441-15454.

[H11] Sobol P., Kola A., Valensin D., **Hecel A.\*** *Inorg. Chem.*, **2026**, 65, 10121-10134.

[H12] Lizak W., Kłopotowska K., Kola A., Valensin D., **Hecel A.\*** *Dalton Trans.*, **2026**, 55, 6558-6571.

[H13] **Hecel A.**, Briccola M., Freisinger E. *Dalton Trans.*, **2026**, 55, 7260-7273.

[H14] **Hecel A.\***, Kola A., Domínguez-Martín A., Valensin D. *Inorg. Chem.*, **2025**, 64, 22615-22630.

[H15] Garstka-Litwin K., Kozłowski H., Rowińska-Żyrek M., **Hecel A.\*** *Coord. Chem. Rev.*, **2026**, 564, 218076.