



Dr Justyna Andrys-Olek

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN

Rozmowa z autorką pracy:

„Badania obliczeniowe nad syntazą ektoinową”

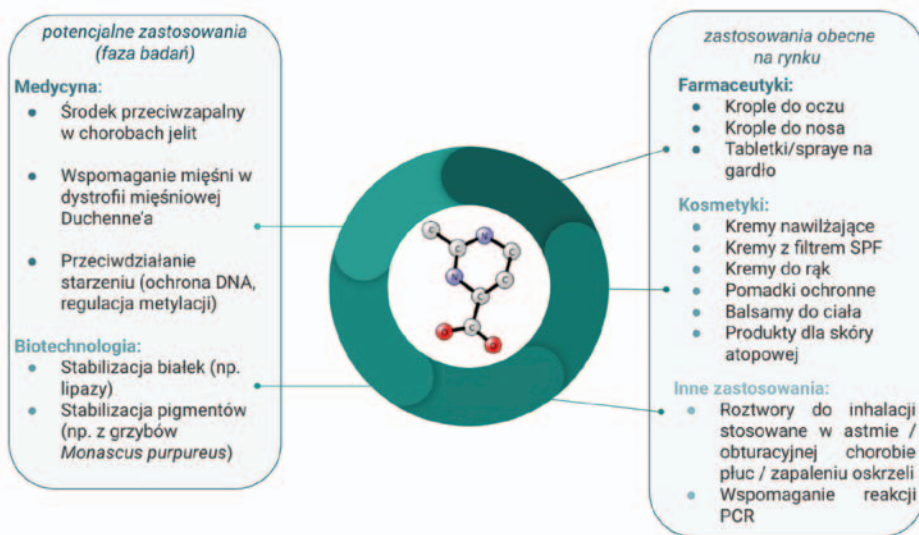
Co zainspirowało Panią do poświęcenia się badaniom nad syntazą ektoinową?

Do badań przede wszystkim zainspirowali mnie wspaniali naukowcy, z którymi współpracowałam. Już na studiach magisterskich dr Anna Wójcik-Augustyn zaszczerpiła we mnie pasję do chemii obliczeniowej, którą później podsyłali profesor Tomasz Borowski oraz koledzy z grupy Biokatalizy Teoretycznej i Eksperymentalnej w IKIFP PAN, wspierając mój rozwój w badaniach nad enzymem. W szczególności nieoceniony był mentoring profesora Borowskiego, dający nadzieję w trudniejszych momentach doktoratu, ale też satysfakcję przy mniejszych lub większych sukcesach. Motywacji dodawał sam projekt, który stanowił ciekawe wyzwanie intelektualne: należało najpierw wyjaśnić nietypowe wiązanie jonu żelaza w centrum aktywnym i określić jego stan spinowy, później odtworzyć rzeczywiste ruchy białka w symulacjach dynamiki molekularnej, a na końcu przejść do obliczeń kwantowo-mechanicznych, by poznać szczegóły mechanizmu reakcji chemicznej zachodzącej w enzymie. Nie sposób pominąć praktycznego wymiaru moich badań. Ektoina, która jest produktem badanej reakcji, znajduje szerokie zastosowanie w kosmetykach pielęgnacyjnych, z których sama często korzystam. Świadomość, że mogę dołożyć cegiełkę

do stanu wiedzy o tym związku i lepiej zrozumieć jego rolę w organizmach bakteryjnych była dla mnie dodatkową inspiracją.

Czy mogłaby Pani krótko przybliżyć naszym czytelnikom ten temat?

Syntaza ektoinowa to białko występujące głównie w organizmach bakteryjnych, które zaadaptowały się do życia w warunkach ekstremalnego zasolenia lub ekstremalnych temperatur. Produktem reakcji katalizowanej przez ten enzym jest ektoina, naturalny związek pełniący funkcje ochronne dla komórek. Pomimo że został on od-



Zastosowania ektoiny

kryty już w latach 80-tych ubiegłego wieku, cieszy się on rosnącym zainteresowaniem, głównie ze względu na swoje właściwości nawilżające i przeciwzapalne, dzięki którym stosowany jest obecnie jako składnik leków oraz kosmetyków, a nowe potencjalne zastosowania są ciągle badane. W swojej pracy zastosowałam symulacje molekularne oraz obliczenia kwantowo-mechaniczne, dzięki którym wyjaśniłam rolę jonu żelaza w centrum aktywnym enzymu, ustaliłam jego geometrię i stan spinowy,

a następnie zaproponowałam szczegółowy trzyetapowy mechanizm reakcji wraz z oszacowaniem barier energetycznych: od zamknięcia pierścienia z deprotonacją grupy aminowej substratu, przez transfer protonu z reszty tyrozyny (jednego z aminokwasów wiążących żelazo) na tlen produktu, aż po eliminację grupy hydroksylowej skutkującą powstaniem ektoiny. Lepsze zrozumienie reakcji katalizowanej przez syntazę ektoinową może pomóc w projektowaniu skuteczniejszych biokatalizatorów do produkcji ektoiny na skalę przemysłową.

W jaki sposób zasoby oferowane przez Cyfronet pomogły w Pani badaniach?

Zasoby oferowane przez Cyfronet były niezbędne do badań nad syntazą ektoinową. Moje symulacje oraz obliczenia kwantowo-mechaniczne pochłaniały setki godzin obliczeniowych z grantów, za które dziękowałam w publikacjach oraz na wystąpieniach konferencyjnych. W szczególności, kluczową rolę w mojej pracy odegrały trzy narzędzia chemii obliczeniowej: pakiet AMBER, program Gaussian oraz program ORCA.

Jakie są największe mity lub nieporozumienia dotyczące Pani dziedziny?

Wiele razy słyszałam, szczególnie od naukowców zajmujących się pracą laboratoryjną, że biochemia obliczeniowa wydaje się im zbyt trudna i niedostępna. W rzeczywistości, po opanowaniu podstaw i samodzielnym przeprowadzeniu pierwszych obliczeń na rzeczywistych modelach białek, można dostrzec logikę i odnaleźć się w świecie modelowania. Kluczowe są cierpliwość i wytrwałość – obliczenia kwantowo-mechaniczne potrafią trwać tygodniami i często wymagają poprawek oraz weryfikacji wcześniejszych założeń, cofając obliczeniowca do punktu wyjścia. Uważam jednak, że każda pomyłka lub nie-trafione założenie to cenna lekcja i doświadczenie, które wzbogacają warsztat badawczy.

Jakiej rady mogłaby Pani udzielić osobom planującym rozpoczęcie kariery naukowej?

Przede wszystkim, przed podjęciem kariery naukowej, zwłaszcza na etapie doktoratu, należy dobrze przemyśleć, do jakiego środowiska naukowego planuje się dołączyć. Znajomość promotora oraz tematyki badań jest kluczowa, ponieważ jest to czynnik, który może dać zarówno satysfakcję oraz radość z pracy, jak i niestety rozczarowanie i frustrację. Wybór motywujących mentorów jest moim zdaniem jednym z najważniejszych elementów w karierze naukowej. Ważna jest też wytrwałość: doktorat to ciągły balans między sukcesami a porażkami, dlatego bardzo istotne jest szukanie wsparcia wśród osób mających podobne doświadczenia (np. koledzy z roku), doświadczających podobnych rozterek. Wiedząc, że porażki są częścią życia naukowego, można czerpać większą radość z sukcesów i osiągnięć. Ważnym elementem życia młodego naukowca jest networking, który pozwala zdobyć praktyczną wiedzę, której często nie znajdziemy w książkach. Na koniec, warto stawiać sobie realne cele i konsekwentnie je realizować, nie zapominając jednak o równoważeniu kariery z życiem osobistym. Moją radą dla adeptów pracy w nauce jest, by nie zapominali, że poza laboratorium lub komputerem też jest życie, i że warto z niego korzystać. Często rezygnacja z jednej konferencji na rzecz wycieczki na łono natury może przynieść więcej korzyści niż się wydaje, a zwolnienie tempa może stać się katalizatorem dla nowych pomysłów.

Jakie są Pani cele na przyszłość w kontekście badań naukowych?

Obecnie staram się zdobyć więcej wiedzy na temat analizy danych w kontekście medycznym, ale także biochemicznym, pracując na stanowisku post-doc w data science. Uważam, że przy obecnym tempie rozwoju technologii warto dodać do warsztatu umiejętności również programowanie, znajomość algorytmów machine learningu oraz innych należących do szeroko pojętej sztucznej inteligencji. Znajomość tych narzędzi może pomóc mi później w aplikowaniu ich w gałęzi biochemii i biotechnologii, ponieważ ostatnio bardzo mocno widoczna jest integracja branży IT z biomedycznymi.