



## Dr inż. Karolina Zawadzińska

### Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki

#### Rozmowa z autorką pracy:

#### „Synteza nowych nitrofunkcjonalizowanych połączeń heterocyklicznych na drodze [3+2] cykloaddycji”

*Jak mogłaby Pani krótko wyjaśnić przedmiot swoich badań osobie niezwiązanej z dziedziną?*

Przedmiotem moich badań była synteza i teoretyczny opis biologicznie aktywnych, cyklicznych związków organicznych, które w swojej strukturze zawierają tzw. heteroatomy – tlen i azot. Prościej mówiąc, badałam książkowy przebieg reakcji, które wcześniej udało mi się wykonać eksperymentalnie. Ponadto, w mojej pracy zdeterminowałam potencjalną aktywność biologiczną tych związków, czyli określiłam ich przydatność w zastosowaniu jako lekarstwa lub herbicydy.

*W badaniach wykorzystała Pani łącznie kilkanaście technik obliczeniowych oraz eksperymentalnych, stanowiących kolejne kroki do osiągnięcia zamierzonych celów. Na ile ta kolejność została z góry ustalona, a na ile wprowadzała Pani elastyczne zmiany w trakcie badań?*

W nauce trzeba być elastycznym, ale, rzecz jasna, w granicach rozsądku. Przy opisie teoretycznym reakcji chemicznych zwykle tok obliczeń, jak i zastosowanie danych technik obliczeniowych są założone z góry, jednak w praktyce bywają także odstępstwa od normy. Jako naukowiec, analizując otrzymane wyniki muszę być na tyle elastyczną, aby bazować jedynie na rzetelnych rezultatach i nie naginać teorii tylko po to, by wpasowała się w jakieś założenia. W nauce czasami trzeba dopasować się do badanego obiektu, rzadko bywa tak, żeby to obiekt dopasował się do nas. Szczególnie widać to na przykładzie eksperymentowania w chemii organicznej, gdzie często trzeba dużo kombinować, aby „zmusić” obiekt badań do współpracy.

*Jak przedstawia się potencjał aplikacyjny otrzymanych związków?*

Obecność heteroatomów w strukturze związków organicznych zwiększa ich biologiczną aktywność, a co za tym idzie, zakres ich potencjalnych aplikacji. Wiele podobnych strukturalnie związków do tych przeze mnie syntezowanych znajduje już zastosowanie jako leki przeciwzapalne, ale przede wszystkim, jako środki przeciwpasożytnicze w weterynarii, jak np. Fluralaner wykorzystywany w popularnych środkach Bravecto dla psów i kotów przeciwko ekto-pasożytom. Te doniesienia literaturowe postanowiłam sprawdzić w odniesieniu do moich związków. Okazało się, że potencjalną aplikacją moich izoksazolin są właśnie środki przeciwbólowe i przeciwzapalne.

*Jakie największe przeszkody pojawiły się w Pani pracy badawczej i jak udało się je przezwyciężyć?*

Na drodze wykonywania badań do mojej pracy doktorskiej pojawiło się bardzo dużo wybojów i przeszkód. Można powiedzieć, że każdy dzień przynosił nowe wyzwania, z którymi nierzadko ciężko było sobie poradzić. Najtrudniejszym był jednak etap syntezy i oczyszczania otrzymanych

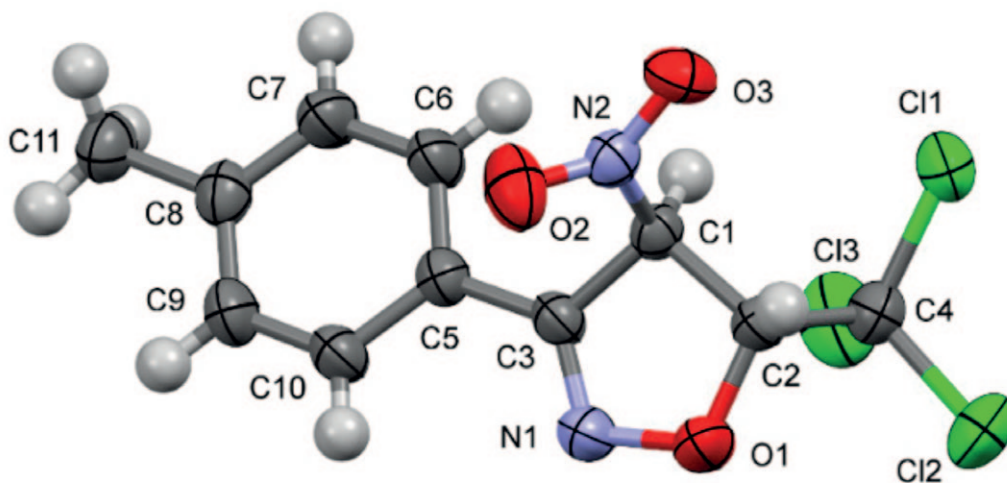
przeze mnie związków. Etap ten wymagał ogromnego poświęcenia i cierpliwości, a także pracy zespołowej.

*W jaki sposób zasoby Cyfronetu przysłużyły się do realizacji części badań związanej z obliczeniami i ich analizą?*

Bez możliwości korzystania z mocy obliczeniowej superkomputerów Cyfronetu nie mogłabym tak sprawnie przeprowadzić w zasadzie żadnych badań. Wszystkie swoje zaplanowane kroki w pracy badawczej opierałam głównie na modelowaniu komputerowym przebiegu reakcji, żeby wiedzieć, czy jest ona w ogóle możliwa do zrealizowania. Niewątpliwie, obliczenia przyczyniły się do skrócenia czasu poszukiwania błędów i rozwiązań eksperymentalnych, dzięki obliczeniom mogłam zaoszczędzić odczynniki, a wreszcie mogłam skupić się na tych reakcjach, które faktycznie miały jakiś sens.

*Jakimi radami lub przemyśleniami mogłaby Pani podzielić się z naukowcami dopiero zaczynającymi szkoły doktorskie?*

Na pewno nie poddawajcie się! Prowadzenie badań w różnych dziedzinach, bo nie tylko w chemii, jest bardzo ciężkie, a wiele z nich może skończyć się fiaskiem. Jednak pamiętajcie, że każdy uzyskany wynik jest wartościowy! Bądźcie ciekawi wszystkich szczegółów, bo czasami to one odgrywają główną rolę. Chętnie wychodźcie poza utarte schematy.



*Wizualizacja struktury molekularnej izoksazoliny na podstawie pomiarów XRD dyfrakcji rentgenowskiej*