



Maciej Roman – autor pracy „Analiza wtórnych metabolitów roślin przy użyciu metod spektroskopii oscylacyjnej oraz obliczeń kwantowo-chemicznych”. Badania eksperymentalne i teoretyczne dotyczyły identyfikacji i dystrybucji trzech grup związków substancji czynnych w roślinach jadalnych i lekach.

Kiedy zaczął Pan rozwijać swoje zainteresowania?

Zamiłowanie do nauk chemicznych zrodziło się już w dzieciństwie. W dużej mierze było to zasługą innego chemika w rodzinie – mojej babci. Natomiast najbardziej intensywnym okresem, w którym odkrywałem wiele interesujących mnie rzeczy, był czas studiów. Wtedy to zauważyłem, że chemia przenika się z wieloma innymi dziedzinami – z biologią, informatyką, fizyką, matematyką. Stąd był już tylko jeden krok do realizacji tematu pracy doktorskiej.

Czego dokładnie dotyczyły Pańskie badania?

Badania były dwutorowe. Pierwsze, eksperymentalne, zostały przeprowadzone m.in. w celu uzyskania odpowiedzi na pytania: czy obierając warzywa ze skórki nie wyrzucamy tych części rośliny, które są bogate w substancje prozdrowotne oraz czy dzieląc leki na pół nie narażamy się na sytuację, że pierwsza część spowoduje przedawkowanie, a druga nie zadziała wcale? Stąd też moim zadaniem była identyfikacja związków takich jak poliacetyleny, karotenoidy i alkaloidy w wybranych roślinach i lekach. Na podstawie przeprowadzonych analiz mogłem określić dystrybucję przestrzenną substancji czynnych biologicznie w konkretnych tkankach badanych roślin oraz określić wydajność procesu mieszania składników w badanych produktach farmaceutycznych. Dodatkowo prowadziłem badania nad wpływem czynników zewnętrznych, takich jak temperatura czy pH, na naturalne substancje czynne.

Duża część pracy została poświęcona obliczeniom kwantowo-chemicznym, które pozwoliły na przewidywanie możliwych ułożeń cząsteczek w przestrzeni. Dzięki wynikom symulacji komputerowych możliwe było określenie, które formy występują w przyrodzie i są przez nią preferowane, a które istnieją jedynie w teorii, czyli w środowisku naturalnym byłyby niestabilne. Wiedza ta pozwoliła na interpretację wyników otrzymanych z badań eksperymentalnych.

Jakich narzędzi używał Pan w swojej pracy?

W części eksperymentalnej przeważały metody spektroskopii oscylacyjnej: spektroskopia w podczerwieni i ramanowska. Bardziej przyjazną dla użytkownika jest metoda Ramana, ponieważ można dzięki niej badać próbki takimi, jakimi są – po pokrojeniu i wysuszeniu roślin nie musiałem w nie bardziej ingerować. Wyniki były interpretowane na podstawie danych literaturowych oraz obliczeń teoretycznych. Wykorzystując dość czasochłonną metodę mapowania przedstawiłem rozkład przestrzenny interesujących mnie związków na powierzchni badanego materiału.

Część teoretyczna została wykonana przy użyciu superkomputerów z Cyfronetu: *Pandy*, następnie

Baribala, później *Marsa*, a w końcu – *Zeusa*. Symulacje pozwoliły na wyznaczenie geometrii i częstości drgań harmoniczych oraz rozkładów energii potencjalnej dla drgań normalnych, do czego używałem oprogramowania Gaussian, Gar2ped i VEDA oraz kilku pomocniczych, autorskich skryptów.

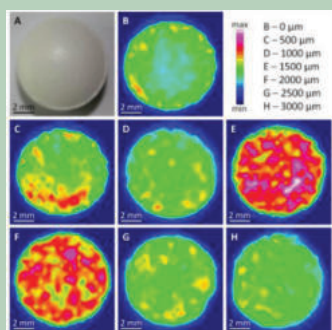
Ile czasu zajęły obliczenia kwantowo-chemiczne?

Czas trwania poszczególnych zadań obliczeniowych jest silnie skorelowany z przyjmowanymi parametrami – im dokładniejsze wyniki chciałem uzyskać, tym dłuższy czas oczekiwania na rezultaty prowadzonych obliczeń. Dla zasymulowania struktury nawet stosunkowo prostej cząsteczki (kilkanaście-kilkadziesiąt atomów) potrzebowalibyśmy kilku dni na zwykłym PC, dlatego od razu zacząłem korzystać z dostępnej w Cyfroniecie infrastruktury. Czas oczekiwania na efekty obliczeń był coraz krótszy – w miarę korzystania z komputerów o coraz większej mocy obliczeniowej, udostępnionych przez Centrum, a możliwość równoległego uruchamiania obliczeń uważam za wielki krok naprzód.

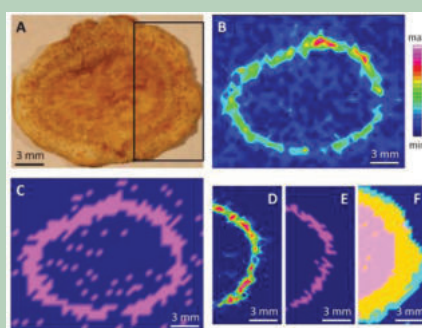
Czy uważa Pan temat za wyczerpany?

Przyroda jest zbyt skomplikowana, żeby mówić o wyczerpaniu tematu. W przypadku każdej z badanych przeze mnie trzech grup związków można powiedzieć, że zamknąłem pewne ścieżki. Oczywiście temat można rozwijać dalej. Istnieją inne związki, których właściwości nie są zbyt dobrze poznane, a ich badanie wymaga wiele cierpliwości i poświęcenia. Zamierzam jednak kontynuować pracę naukową w tym kierunku, skupiając się na wykorzystywaniu metod spektroskopii oscylacyjnej do badań w skali „mikro”, a być może nawet „nano”, m.in. w badaniach komórek.

Dziękuję za rozmowę.



Dystrybucja chininy w badanej tabletce leku



Rozkład przestrzenny poliacylenów w tkankach pietruszki