



**Aneta Buczek – autorka pracy doktorskiej „Właściwości konformacyjne pochodnych  $\alpha,\beta$ -dehydrofenyloalaniny”, w której określiła, jaki wpływ na konformację łańcucha peptydowego ma połączenie w obrębie jednej reszty aminokwasowej dwóch modyfikacji strukturalnych: wiązania podwójnego pomiędzy atomami węgla  $C^\alpha$  a  $C^\beta$  oraz trzeciorzędowego wiązania amidowego od strony C-końca.**

*Co zdecydowało o wyborze kierunku studiów?*

Właściwie już w szkole podstawowej interesowałam się chemią. Z zainteresowaniem słuchałam opisu przebiegu poszczególnych reakcji, lubiłam pisać ich równania czy dobierać współczynniki stechiometryczne. Do dziś pamiętam przeprowadzanie różnych doświadczeń chemicznych – można powiedzieć, że w ten sposób rozpoczęła się moja przygoda z chemią. Naukę kontynuowałam w Technikum Chemicznym, a następnie zdecydowałam się podjąć studia w Opolu na Wydziale Chemii.

Praca doktorska była kontynuacją mojej pracy magisterskiej. Uwielbiam pracować w laboratorium i syntezować moje dehydroaminokwasy, a jednocześnie prowadzić obliczenia kwantowe. Ogromnym ułatwieniem była dla mnie możliwość prowadzenia obliczeń zarówno z domu jak i z Uczelni, bez względu na porę dnia czy nocy.

*Jakie były etapy realizacji pracy doktorskiej i który był najbardziej wymagający?*

W pierwszej fazie badań syntezowałam pochodne  $\alpha,\beta$ -dehydrofenyloalaniny (DPhe), które następnie analizowałam zarówno metodami teoretycznymi, jak i eksperymentalnymi na przykładzie wybranych modelowych związków zawierających izomer *Z* lub *E* reszty DPhe, łączących takie elementy strukturalne jak reszta dehydro, grupę metylową na węglu  $C^\beta$  i drugo- bądź trzeciorzędowy układ amidowy. Jednym z najbardziej wymagających etapów była synteza związków chemicznych, a następnie ich oczyszczanie. Po każdym etapie sprawdzałam, czy otrzymałam właściwy produkt i zawsze towarzyszył temu dreszczyk emocji: czy jestem na dobrej drodze, czy też nie. Syntezy, które prowadziłam, z reguły kończyły się sukcesem. Natomiast rezultaty otrzymane na podstawie wyników obliczeń teoretycznych były porównywane z danymi eksperymentalnymi otrzymanymi ze spektroskopowych analiz otrzymanych związków. W większości przypadków rezultaty te dość dobrze pokrywały się ze sobą.

*Już na początku kariery naukowej odkryła Pani możliwości, jakie dają superkomputery.*

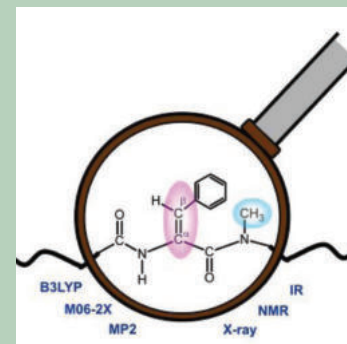
Zgadza się. Z Cyfronetem współpracowałam jeszcze w trakcie trwania studiów magisterskich. Centrum w pełni umożliwiło mi wykonanie części teoretycznej mojej pracy doktorskiej. Pracownicy Cyfronetu byli zawsze bardzo serdeczni i życzliwi. W profesjonalny sposób pomagali w rozwiązywaniu moich problemów związanych z obliczeniami. Szczególnie doceniam bezpośredni kontakt w trakcie corocznych Konferencji Użytkowników KDM organizowanych przez ACK Cyfronet AGH. Można wtedy osobiście poruszyć kwestie związane z optymalnym wykorzystaniem sprzętu i oprogramowania.

*W jaki sposób Pani osiągnięcia wpłyną na dalsze planowane badania?*

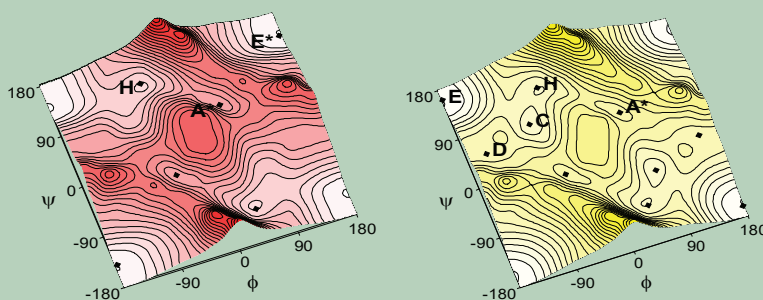
Wyniki pozwoliły na poznanie właściwości konformacyjnych izomeru E dehydrofenyloalaniny i wskazanie różnic w porównaniu do izomeru Z. Ponadto, określiłam w mojej pracy wpływ  $\beta$ - i N-metylowania na strukturę obu izomerów. Zebrane informacje umożliwią bardziej efektywne stosowanie obu izomerów geometrycznych dehydrofenyloalaniny jako nowych strukturalnych merów aminokwasowych, użytecznych w projektowaniu bioaktywnych peptydów. Związki te mają potencjalnie duże znaczenie praktyczne jako nowe prekursory leków przeciwnowotworowych oraz antybiotyków, na które nie są uodpornione szczepy bakterii stwarzające obecnie duże problemy w leczeniu szpitalnym. Wyniki dotyczące właściwości elektronowych oraz sterycznych badanych związków pozwolą na zrozumienie wpływu topologii łańcucha bocznego,  $\beta$ - i N-metylowania na zdolność peptydu do tworzenia określonych struktur drugorzędowych.

*Jakie ma Pani plany na najbliższą przyszłość?*

W trakcie pracy doktorskiej zebrałam dość znaczną ilość materiału badawczego. Tylko część tych wyników została dotychczas opublikowana. Tak więc najbliższe kilkanaście tygodni spędzę na tej, dla mnie, mniej wdzięcznej części zawodu badacza – pisaniu artykułów naukowych. Natomiast jeśli chodzi o badania naukowe, to zamierzam podjąć nowe wyzwania związane z nanotechnologią i biotechnologią. Te dwie dziedziny nauki rozwijają się obecnie bardzo dynamicznie i związane są z nimi nadzieje zarówno dotyczące badań podstawowych jak również bezpośredniego zastosowania, w szczególności w nauce o materiałach, farmacji i innych obszarach.



*Ilustracja dwóch modyfikacji strukturalnych w obrębie jednej reszty aminokwasowej: wiązania podwójnego pomiędzy atomami węgla C $\alpha$  a C $\beta$  oraz trzeciorzędowego wiązania amidowego od strony C-końca*



*Mapy Ramachandrana izomeru E Ac- $\Delta$ Phe-NHMe w próżni obliczone metodą B3LYP/6-31+G\*\* (A) oraz MP2/6-31+G\*\* (B)*