



## dr Agnieszka Rugor

**Rozmowa z autorką pracy: „Oksydoreduktazy ze *Sterolibacterium denitrificans* jako biokatalizatory do reakcji utleniania pochodnych sterolowych”.**

*Proszę opowiedzieć o swoich początkach, jeśli chodzi o zainteresowanie biologią czy nauką w ogóle.*

Na etapie wyboru szkoły średniej najpierw zdecydowałam się na liceum plastyczne. Zostało mi ono jednak odradzone przez alergologa, z uwagi na występujące u mnie silne uczulenie na metale ciężkie zawarte w farbach. Nauki przyrodnicze były mi bliskie na równi z plastyką, dlatego naturalnym wyborem było podjęcie edukacji w klasie o profilu biologiczno-chemicznym. Po ukończeniu liceum planowałam w dalszym ciągu kształcić się w kierunku biologii. Biotechnologia, o której wówczas niewiele wiedziałam, wydała mi się najciekawszym wyborem. Wyjazd w ramach programu LLP Erasmus potwierdził słuszność tego wyboru. Dodatkowo okazało się, że praca w laboratorium sprawia mi bardzo dużą przyjemność.

*Jeden z recenzentów ocenił Pani pracę pozytywnie, m.in. przez wzgląd na jej interdyscyplinarność. Jaka była motywacja takiego kierunku?*

Interdyscyplinarność leżała u podstawy tematów realizowanych w ramach programu Interdyscyplinarnych Studiów Doktoranckich „Nauki molekularne dla medycyny” MOL-MED. W mojej pracy badałam enzym, dehydrogenazę C25 steroidową (S25DH), bio-katalizator pochodzenia bakteryjnego, który jest zdolny do prowadzenia regioselektywnej reakcji, przekształcając np. witaminę D<sub>3</sub> w aktywowaną formę witaminy, tzw. kalcyfediol (25-hydroksylowana wit. D<sub>3</sub>, lek podawany m.in. przy niedoborach witaminy D lub dysfunkcjach wątroby). Bio-katalizator badałam na dwóch płaszczyznach: eksperymentalnie oraz z zastosowaniem metod teoretycznych. W eksperymencie izolowałam enzym z bakterii i testowałam w różnych warunkach w produkcji aktywowanych steroli, tak by wykazać realny potencjał w zastosowaniu enzymu do tworzenia użytecznych związków, w tym potencjalnych leków, jak np. 25-hydroksycholesterol. Z kolei metody teoretyczne polegały na zgłębieniu wiedzy odnośnie samej struktury bio-katalizatora. W skład metod teoretycznych wchodziły więc algorytmy komputerowe pozwalające wymodelować strukturę enzymu, takie jak modelowanie homologiczne, dokowanie substratu oraz symulacje dynamiki molekularnej. Badania eksperymentalne oraz teoretyczne fantastycznie się uzupełniają i w nauce bardzo często są razem zestawiane.

*Proszę powiedzieć czy wyniki Pani badań mają praktyczny wymiar, czy zwykły Kowalski zetknie się z efektami Pani pracy?*

Jeśli odpowiedź miałaby brzmieć „tak”, to do tego dość daleka droga. Biotechnologia jako przemysł obecnie bardzo prężnie się rozwija i coraz częściej zdarza się, że zastosowanie bio-katalizatora

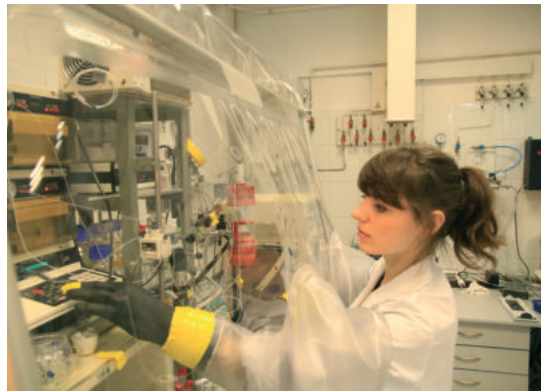
zamiast tradycyjnej syntezy chemicznej jest ekonomicznie lub społecznie (ochrona środowiska) opłacalne. W wyniku mojej pracy w ramach doktoratu powstały 4 wnioski patentowe, a dalsza praca nad projektem zaowocowała 5-tym, w końcu 2015 roku. Wszystkie te wnioski niosą potencjał aplikacyjny w syntezie związków o znaczeniu farmakologicznym, innymi słowy, opracowane metody syntezy teoretycznie mogą być użyte do produkcji substancji biologicznie aktywnych (np. sterydy anaboliczne) lub leków (np. kalcyfediol).

*Proszę opowiedzieć, w jaki sposób dowiedziała się Pani o zasobach Cyfronetu? Z jakich narzędzi Pani korzystała i jakie ma Pani wrażenia w związku ze współpracą z naszą jednostką.*

Zasoby obliczeniowe Cyfronetu są wykorzystywane przez członków mojej grupy badawczej w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w Krakowie; ucząc się od nich i współpracując z nimi ja również trafiłam na te zasoby. W pracy obliczeniowej bardzo dużo korzystałam z programu Discovery Studio (Biovia) dostępnego na komputerze Mars. Ponadto, badany w doktoracie enzym zawiera złożony kofaktor molibdenowy, który wymagał sparametryzowania. W tym celu były wykonywane obliczenia kwantowe na komputerze Zeus (Gaussian). Dodatkowo część symulacji dynamiki molekularnej była wykonywana przy wykorzystaniu kart z procesorami graficznymi GPGPU dostępnych w Cyfronecie. Moje wrażenia – bardzo dobre. Szczególnie program DS – bardzo użyteczny, gdyby nie dostęp przez Cyfronet, nie byłibyśmy w stanie zakupić licencji.

*Czy w dalszym ciągu jest Pani związana z nauką? Jakie są Pani plany?*

Pracuję ciągle w nauce i nie zamierzam tego zmieniać. Obecnie kontynuuję temat rozpoczęty w trakcie doktoratu. Temat był nowy, świeży oraz uchwycony w bardzo szerokim spektrum (dwa projekty badawcze: jeden aplikacyjny w NCBiR, drugi – nauka podstawowa w NCN). Obecnie przygotowuję hodowlę bakterii w skali 100 L, by zabezpieczyć materiał do dalszych badań. Będziemy testować m.in. syntezę kalcyfediolu w skali 50 L u partnera przemysłowego, by określić opłacalność procesu oraz w najbliższym czasie pragniemy przebadać aglomerację drugiego enzymu badanego w moim doktoracie. W dalszej perspektywie planuję wyjazd na staż zagraniczny.



*W trakcie pracy w laboratorium*

*Proszę o radę dla młodych osób, które planują podjęcie studiów doktoranckich.*

Oprócz tego, że praca w laboratorium daje dużo radości, uczy samodzielności, daje swego rodzaju niezależność oraz stawia wyzwania, należy pamiętać, że wyniki nigdy nie przychodzą łatwo. Trzeba zatem przede wszystkim być wytrwałym. Nie zrażać się niepowodzeniami. Doktorat to zajęcie, które dość mocno angażuje, ale fantastycznie rozwija człowieka na wielu płaszczyznach. Dla osoby z natury ciekawskiej, dociekliwej jest to wyzwanie warte podjęcia.