



Dr Ewa Machalska

Rozmowa z autorką pracy:

„Badania wzmocnienia sygnału ramanowskiej aktywności optycznej układów molekularnych”

Co w największym stopniu skłoniło Panią do realizacji badań w oparciu o rejestrację i analizę widm ROA?

Ramanowską aktywnością optyczną (ROA), jak też elektronowym dichroizmem kołowym (ECD) zainteresowałam się w trakcie pracy magisterskiej, w ramach której skupiłam się na eksperymentalnym i teoretycznym wyjaśnieniu procesu agregacji chiralnych karotenoidów. Następnie, chęć kontynuacji rozpoczętych badań i możliwość praktycznego zastosowania spektroskopii ROA w wielu dziedzinach nauki, w tym w obszarach biomedycznych, skłoniła mnie do podjęcia studiów doktoranckich na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego oraz dalszego rozwiązywania problemów badawczych, jakie niesie ze sobą, nie pozwalając popaść w rutynę, metoda ROA. Biorąc pod uwagę potencjalnie silny wpływ zmiany chiralności na pożądane właściwości biologiczne i lecznicze cząsteczek, wyjątkowe znaczenie niesie dla mnie aspekt praktycznego wykorzystania technik chiralooptycznych, w tym w przemyśle farmaceutycznym.

W jakim zakresie ułatwieniem, a w jakim utrudnieniem jest fakt, że spektroskopia rozpraszania ramanowskiego jest obszarem o stosunkowo niskim poziomie eksploracji?

W mojej opinii, na przełomie ostatnich lat spektroskopia rozpraszania ramanowskiego, mimo iż oparta jest na stosunkowo słabym efekcie, wzmocniła swój poziom eksploatacji w wielu obszarach nauki. Wyraźny aplikacyjny charakter spektroskopii ramanowskiej widoczny jest w badaniach biomedycznych, np. w analizie białek, cukrów, lipidów, a także składników krwi, w tym erytrocytów oraz leukocytów. Z pewnymi niedogodnościami, jakie bez wątplenia niesie ze sobą spektroskopia ramanowska, grono naukowców nauczyło się walczyć poprzez opracowanie nowych strategii wzmacniających uzyskiwany sygnał ramanowski.

Co w Pani badaniach stanowiło największe wyzwanie i w jaki sposób sobie Pani z nim poradziła?

Niewątpliwie najbardziej czasochłonne, ale też niezwykle intrygujące wyzwanie stanowiły dla mnie badania nad szeregiem pochodnych witaminy B₁₂, na przykładzie których udało się odkryć i wyjaśnić nieznanym wcześniej w literaturze efekt ECD-Raman, czyli interferencję zjawiska elektronowego dichroizmu kołowego oraz rozpraszania ramanowskiego, który zdominował naturalne rezonansowe widmo ROA kobalamin. Po wielu miesiącach pracy w laboratorium, generalnie polegających na rejestracji wzmocnionych rezonansowo widm ROA analogów kobalamin, wspólnie z promotorem mojej rozprawy doktorskiej Panią Prof. dr hab. Małgorzatą Barańską jak też Panem dr Grzegorzem Zającem udało się nam opracować kilka eksperymentalnych oraz teoretycznych strategii eliminacji efektu ECD-Raman na rezonansowych widmach ROA. Co więcej, skrupulatne badania pochodnych witaminy B₁₂ doprowadziły nas do wniosku, iż uzyskanie wiarygodnego rezonansowego widma ROA barwnych substancji jest możliwe, ale tylko wtedy, gdy pod uwagę weźmie się efekt ECD-Raman. W przeciwnym wypadku, nieuwzględnienie potencjalnego wystąpienia zjawiska ECD-Raman podczas pomiarów rezonansowych widm ROA może prowadzić do błędnych interpretacji chiralooptycznych widm i wniosków dotyczących struktury molekularnej nie tylko kobalamin, ale również wielu innych chiralnych związków.

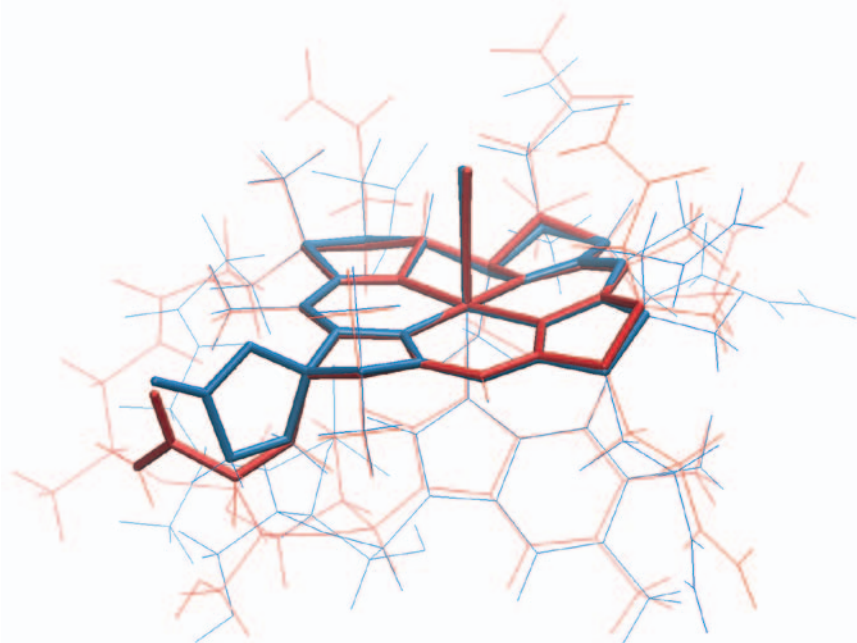
W jaki sposób skorzystała Pani z zasobów udostępnianych przez Cyfronet? W czym były najbardziej pomocne?

W badaniach, które stanowiły podstawę mojej rozprawy doktorskiej, poprzez infrastrukturę PLGrid wykorzystywałam zasoby obliczeniowe superkomputera Prometheus. W tym miejscu chciałabym zaznaczyć, że efektywne obliczenia kwantowo-chemiczne nie byłyby możliwe bez owocnej współpracy z Panem dr Grzegorzem Zającem z Jagiellońskiego Centrum Rozwoju Leków w Krakowie.

Bez wątplenia zasoby obliczeniowe udostępnione przez Cyfronet były najbardziej pomocne na etapie wyjaśnienia wzmocnionych rezonansowo widm ROA witaminy B₁₂ i jej pochodnych. Wykonane obliczenia, z jednej strony, pozwoliły na uzyskanie widm ROA, których profil pozostawał w bardzo dobrej zgodności z wynikami eksperymentalnymi, a z drugiej symulacje widm były niepodważalnym potwierdzeniem dwuznakowości eksperymentalnych widm ROA.

Jaką poradę mogliby od Pani otrzymać młodzi naukowcy, którzy dopiero rozpoczynają pracę nad doktoratem lub planują ją rozpocząć?

Myślę, że najlepszą poradą, jaką mogę z całą pewnością dać wszystkim kandydatom rozpoczynającym studia doktoranckie, to żeby nie bali się oni nowych wyzwań, jakie stawia przed nimi nauka. Na pozór interdyscyplinarność podejmowanych badań może, z jednej strony, być niezwykle trudnym oraz przerażającym zadaniem dla każdego młodego naukowca, ale z drugiej, po pewnym czasie, pozwoli im stworzyć świeże, odmienne od dotychczasowego podejście do problemów badawczych. Jest to możliwe do osiągnięcia przede wszystkim wtedy, gdy Doktoranci będą podejmować się tematów, które ich fascynują, cieszą, a zarazem są potężnym fundamentem do kreowania nowych pomysłów, które mogą wykorzystać w przyszłości.



Porównanie zoptymalizowanych struktur najbardziej stabilnych konformerów witaminy B₁₂ ((CN)Cbl, kolor niebieski) oraz jej pochodnej ((CN)13-epi-Cbl(e-lakton), kolor czerwony). Pierścienie korynowy i łańcuchy boczne c zostały pogrubione