

dr inż. Agnieszka Kącka-Zych

Rozmowa z autorką pracy:
„Teoretyczne studia nad mechanizmem eliminacji kwasów karboksylowych z estrów nitroalkoholi".

Jak rozwinęło się Pani zainteresowanie chemią i pokrewnymi dziedzinami?

Chemia interesowała mnie już w liceum. Natomiast na pierwszym roku studiów ta dziedzina naprawdę mnie zafascynowała, szczególnie chemia organiczna. Podczas studiów pracowałam w Kole Naukowym Chemików, prowadzonym przez profesora Radomira Jasińskiego, który później został promotorem mojej pracy doktorskiej.

Czego oczekiwała Pani od studiów doktoranckich jeszcze przed ich rozpoczęciem?

Przede wszystkim oczekiwałam rozwoju osobistego, poszerzenia horyzontów oraz tego, że doktorat pozwoli mi dostrzec nowe zjawiska i inaczej spojrzeć na te już znane. Te oczekiwania się spełniły.

Co przekonało Panią do tego, by realizować badania na pograniczu chemii, fizyki i matematyki?

O badaniach interdyscyplinarnych mówimy wtedy, gdy dwie lub więcej dziedzin łączą się, aby stworzyć coś więcej niż tylko sumę ich części. Chodzi o to, aby nie ograniczać się jednym, określonym sposobem myślenia lub rozwiązania problemu, a zamiast tego zdobyć wiedzę i umiejętności w różnych dziedzinach oraz poszukiwać nowych zastosowań dla prowadzonych badań.

Jakie są praktyczne zastosowania badanych przez Panią sprzężonych nitroalkenów?

Sprzężone nitroalkeny okazały się być wartościową grupą surowców w chemii organicznej. Ich silny elektrofilowy charakter czyni z nich ważne prekursory szerokiej gamy związków docelowych. Są również wyjątkowo cennymi związkami wykorzystywanymi w syntezie organicznej. Zastosowanie ich w tej syntezie wynika w dużej mierze z ich łatwego przekształcenia w różne funkcjonalizowane pochodne. Co więcej, związki te odgrywają istotną rolę ze względu na ich aktywność biologiczną. Wśród różnych właściwości biologicznych, przeciwnowotworowe działanie nitroalkenów oraz ich nowych adduktów MBH z aktywowanymi alkenami podkreśliło niesamowity potencjał pochodnych nitroalkenów jako cząsteczek bioaktywnych. Ponadto, nitroalkeny znalazły zastosowanie jako prekursory wielu środków owadobójczych, grzybobójczych oraz produktów leczniczych.

Niektóre z metod wykorzystywanych przez Panią w badaniach były pionierskie w Polsce. Czy może je Pani krótko przedstawić?

Są to metody zaproponowane przez profesora Luisa Domingo, z którym miałam możliwość współpracować w ramach przygotowania mojej rozprawy doktorskiej na Uniwersytecie w Walencji. Teoria Molekularnej Gęstości Elektronowej (ang. *Molecular Electron Density Theory – MEDT*) opiera

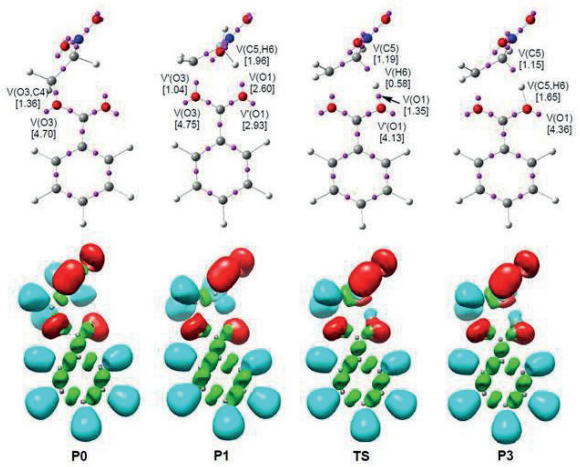
się na założeniu, że chociaż (zgodnie z Teorią Gęstości Elektronowej) rozkład gęstości elektronowej w stanie stacjonarnym jest odpowiedzialny za chemiczne i fizyczne właściwości molekularne, to zdolność do zmiany gęstości elektronowej, a nie oddziaływania orbitali molekularnych, jest odpowiedzialna za reaktywność molekularną. Dlatego też reaktywność w chemii organicznej nie może być scharakteryzowana ani przez energię statyczną, ani przez geometrię odpowiednich punktów krytycznych, ale przez ścisłą analizę zmian molekularnej gęstości elektronowej wzdłuż ścieżki reakcji oraz zmian w energiach wymaganych do osiągnięcia geometrii stanu przejściowego.

Pani badania wymagały przetwarzania dużej ilości danych i wielu obliczeń. W jakim zakresie zasoby oferowane przez Cyfronet okazały się pomocne?

Właściwie cała moja praca doktorska oparta jest na obliczeniach wykonanych na superkomputerze Prometheus, zlokalizowanym w ACK Cyfronet AGH. Jak już wspominałam, prowadziłam również teoretyczne badania z zastosowaniem Teorii Molekularnej Gęstości Elektronowej, która łączy w sobie Teorię Gęstości Elektronowej oraz Teorię Ewolucji Wiązania (ang. *Bonding Evolution Theory – BET*). Obliczenia te nie byłyby możliwe bez pomocy i zaangażowania pracowników Cyfronetu, którym chciałabym serdecznie podziękować.

Jakiej porady udzieliłaby Pani młodym naukowcom, którzy zaczynają studia doktoranckie?

Nie poddawajcie się w dążeniach do celu, a ewentualne błędy czy potknięcia traktujcie jako cenne lekcje. Korzystajcie z ofert wyjazdów międzynarodowych, wymian studenckich, wyjazdów na konferencje. Poznawajcie jak najwięcej inspirujących ludzi i zawsze starajcie się czegoś od nich nauczyć. Bądźcie otwarci na świat i na możliwości, które są w Waszym zasięgu.



Etapy dekompozycji benzoesanu nitroetylu w świetle teorii Funkcji Lokalizacji Elektronów (ELF)