



dr inż. Karolina Kula

Rozmowa z autorką pracy:

„Synteza nowych nitropodstawionych analogów dihydropirazolu na drodze 1,3-dipolarnej cykloaddycji”

W jakich okolicznościach lub na podstawie jakich zdarzeń zdecydowała Pani o tym, żeby zostać naukowcem? Co skłoniło Panią do wyboru chemii jako dziedziny?

Chemia interesowała mnie od zawsze. Już w szkole podstawowej wiązałam z nią przyszłość, dlatego przy wyborze szkoły średniej zdecydowałam udać się do Technikum Chemicznego w Krakowie. Wybór ten jeszcze bardziej utwierdził mnie w przekonaniu, że chemia jest tym czym chcę zajmować się zawodowo. Postanowiłam kontynuować edukację na Wydziale Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej. Po pierwszym roku studiów rozpoczęłam pracę w Kole Fizycznej Chemii Organicznej pod opieką prof. Radomira Jasińskiego, dzięki czemu, już na tak wczesnym etapie kariery zawodowej, mogłam przekonać się, na czym polega praca naukowa. Prowadzone przeze mnie badania zaowocowały udziałem w licznych konferencjach, zarówno krajowych jak i o zasięgu międzynarodowym oraz napisaniem i obroną pracy inżynierskiej oraz magisterskiej. W ramach pracy w kole naukowym syntezowałam nieotrzymywane dotąd połączenia. Wszystkie te czynniki spowodowały, że po zakończeniu studiów podjęłam decyzję o kontynuowaniu nauki na studiach doktoranckich i wzbogaceniu wykonywanych przeze mnie badań eksperymentalnych o obliczenia kwantowo-chemiczne.

W swoich badaniach zsyntezowała Pani 16 nowych związków. Jakich właściwości możemy się po nich spodziewać?

Zsyntezowane przeze mnie połączenia pochodzą w większości z grupy pirazolin oraz pirazoli. Większość tej klasy związków organicznych wykazuje aktywność biologiczną i z powodzeniem stosowana jest jako leki przeciwbólowe, przeciwzapalne, czy przeciwgorączkowe. Co więcej, najnowsze badania dowodzą, że niektóre z nich mogą być stosowane w terapiach nowotworowych. Dodatkowo, związki te są stosowane jako pestycydy oraz barwniki. Warto wspomnieć również, że w strukturze otrzymanych przeze mnie pirazolin oraz pirazoli obecne są dwie grupy funkcyjne: nitrowa oraz trichlorometylowa. Pierwsza z nich, ze względu na wysoką reaktywność, stanowi cenny budulec cząsteczkowy, bowiem z łatwością może ulegać konwersji do różnorodnych grup funkcyjnych. Grupa nitrowa może być prekursorem w preparatyce między innymi nitronatów, amin, hydroksyloamin, oksymów, hydrazyn, azozwiązków, nitryli oraz ich tlenków, a także związków karbonylowych. Daje to szerokie pole dalszej funkcjonalizacji tak zaprojektowanych struktur docelowych. Z kolei, grupa trichlorometylowa stymuluje aktywność biologiczną wielu heterocyklicznych struktur. Związki zawierające tę grupę są między innymi używane jako bloki budulcowe w preparatyce peptydów, oraz stosowane jako środki zwalczające owady i gryzone. Oprócz tego otrzymałam bromki nitrylimin, które są prekursorami otrzymywania cennych komponentów typu TAC, stosowanych w syntezie heterocyklicznych połączeń na drodze reakcji [3+2] cykloaddycji.

Jakie największe trudności Pani napotkała w czasie badań i w jaki sposób je Pani rozwiązała?

Zdecydowanie najtrudniejszym dla mnie etapem badań wykonywanych w ramach doktoratu była część syntetyczna. Prace obejmowały między innymi zaprojektowanie ścieżek otrzymywania poszczególnych związków, ich izolację, oczyszczenie, a następnie identyfikację otrzymanych połączeń w oparciu o dane analiz elementarnych oraz charakterystyki spektralne. Wszystkie wyżej wymienione czynności wymagają znajomości odpowiedniego warsztatu pracy, jak również są i czasochłonne i kosztowne. W związku z powyższym zdecydowałam się na wykonanie obliczeń kwantowo-chemicznych, aby ograniczyć prace związane z eksperymentem.

Na podstawie obliczeń kwantowo-chemicznych przygotowała Pani modele, które dopiero posłużyły do przeprowadzenia eksperymentów. W jaki sposób skorzystała Pani w tym zakresie z zasobów Cyfronetu i jakie są zalety tej kolejności działań?

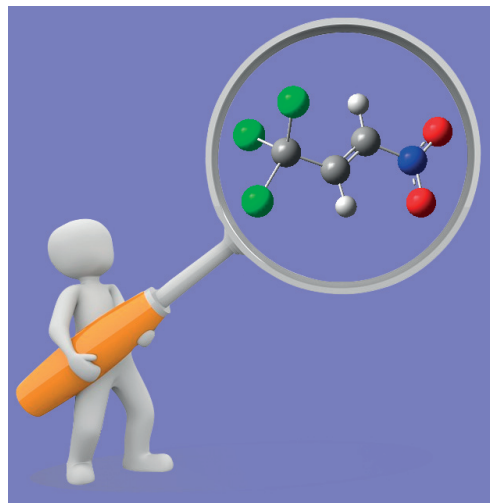
Dzięki zasobom Cyfronetu możliwe było solidne przygotowanie się do wykonania części eksperymentalnej mojej pracy doktorskiej. W głównej mierze obliczenia kwantowo-chemiczne umożliwiły mi dobór odpowiednich warunków dla badanych reakcji. Działanie to w znaczny sposób pozwoliło skrócić czas prowadzonych symulacji na drodze eksperymentalnej, jak również zaoszczędzić drogie, niekiedy szkodliwe, odczynniki. Zastosowanie obliczeń kwantowo-chemicznych dla badań z obszaru chemii organicznej jest szczególnie ważne ze względu na fakt, iż w większości reakcji mamy do czynienia z formowaniem się więcej niż jednego produktu. Połączenia poszczególnych atomów w tworzących się związkach i ich przestrzenne ułożenie ma ogromne znaczenie, zaś teoretyczne rozważania umożliwiły mi wykonanie symulacji hipotetycznych ścieżek dla rozpatrywanych reakcji i pozwoliły na określenie, która z możliwych struktur jest bardziej uprzywilejowana do tworzenia się w danej reakcji.

Na czym, według Pani, powinny się skupić osoby dopiero wchodzące na ścieżkę naukową? Co mogłaby pani tym osobom poradzić?

Jako osoba wykonująca w swojej pracy doktorskiej badania zarówno na gruncie eksperymentalnym, jak i teoretycznym uważam, że dobre podstawy teoretyczne jak i odpowiedni warsztat manualny są ogromnie istotne. Ważne jest, aby oba te czynniki ze sobą współgrały. Dlatego też zachęcam wszystkich młodych ludzi, aby okres studiów wykorzystali jak najlepiej, a jako wykładowca pracujący ze studentami przede wszystkim radzę szukać naukowych problemów, starać się samodzielnie je rozwiązać, ale przede wszystkim nie bać się zadawać pytań prowadzącym. Nie samą jednak nauką człowiek żyje. Chemia jest oczywiście nie tylko moją pracą, ale i pasją, jednak ważne jest posiadanie innych zainteresowań. W czasie pisania pracy doktorskiej ogromnie pomagało mi uprawianie biegów długodystansowych. W tak ciężkim dla mnie okresie wzmózonego wysiłku umysłowego sport pozwalał mi odpocząć. Dla wszystkich ludzi, szczególnie dla młodych osób wkraczających dopiero co w dorosłe życie, wsparcie ze strony najbliższych ma ogromne znaczenie. Dlatego też pragnę złożyć najserdeczniejsze podziękowania moim Promotorom, Rodzicom, Narzeczonemu oraz wszystkim życzliwym osobom za nieustanne wsparcie oraz kibicowanie mi w najtrudniejszych chwilach doktoratu.

“Science walks forward on two feet, namely theory and experiment”

Robert A. Millikan, amerykański fizyk, laureat Nagrody Nobla.



Struktura (E)-3,3,3-trichloro-1-nitroprop-1-enu zastosowanego jako dipolarofil w reakcjach [3+2] cykloaddycji do otrzymywania pirazolin oraz pirazoli