



Dr hab. inż. Katarzyna Pernal

Instytut Fizyki, Politechnika Łódzka

Laureatka programu POMOST (konkurs 1/2010) współfinansowanego ze środków Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

Tytuł projektu: *Opis oddziaływań molekularnych metodami opartymi na rozszerzonym przybliżeniu faz przypadkowych*

Lata realizacji projektu: 10.2010-12.2013

Kwota dofinansowania: 428 300 zł

Liczba stypendystów zatrudnionych w projekcie (łącznie): 1

Gdyby oddziaływania molekularne nie istniały, woda nie byłaby cieczą, enzymy przestałyby funkcjonować, a podwójna helisa DNA rozpadłaby się na pojedyncze łańcuchy. Są one o kilka rzędów wielkości słabsze od oddziaływań wiążących atomy w cząsteczki,

ale kluczowe, jeśli chodzi o zachowanie struktury materii cząsteczkowej w odpowiedniej formie.

Dr hab. inż. Katarzyna Pernal postanowiła opracować nową metodę chemii kwantowej przydatną do opisu tych oddziaływań (chemia kwantowa wykorzystuje prawa i równania znane z mechaniki kwantowej do opisu struktury elektronowej cząsteczek). „Mimo ogromnego postępu, jaki dokonał się w ostatnich latach, jeśli chodzi o rozwój nowych teorii, algorytmów obliczeniowych i komputerów, dokładny opis oddziaływań molekularnych dla cząsteczek o praktycznym znaczeniu pozostaje dużym wyzwaniem. Celem mojego projektu jest rozwój nowej metody obliczeniowej, która z jednej strony da poprawny opis oddziaływań molekularnych, z drugiej zaś znacząco skróci czas obliczeń” – mówi dr hab. inż. Pernal.

W przyszłości jej badania mogą się przyczynić m.in. do lepszego poznania mechanizmów działania enzymów. Na efekty praktyczne trzeba jednak jeszcze poczekać – nawet kilkanaście, kilkadziesiąt lat – do momentu gdy możliwości obliczeniowe komputerów znacznie wzrosną. „Wtedy rozwijane przeze mnie metody będą służyć do projektowania nowych struktur cząsteczkowych, związków chemicznych, dzięki czemu możliwe będzie komputerowe projektowanie leków o założonych właściwościach” – mówi Katarzyna Pernal. Już teraz można jednak mówić o sukcesie. „Niewątpliwie jest nim założenie przeze mnie grupy naukowej, która liczy dziś pięć osób. Jej początkiem było dwoje doktorantów, których zatrudniłam w ramach projektu POMOST, a kolejni dołączyli, zachęceni ciekawą pracą swoich kolegów”.

Program POMOST jest skierowany do naukowców łączących intensywną pracę badawczą z obowiązkami rodziców małych dzieci. „Kobiety, a coraz częściej także mężczyźni, którzy poświęcają się wychowaniu dzieci i łączą to z pracą naukową, zdają wymagający egzamin z wytrwałej pracy, precyzyjnego planowania i wykorzystania czasu. Taki trening często sprawia, że stają się efektywniejsi niż inni” – mówi Katarzyna Pernal. „Rodzicielstwo uczy dyscypliny i intensywnej pracy w ograniczonym czasie. Nie sądzę więc, aby przy dobrej organizacji ograniczało rozwój kariery naukowej”.

Na zdjęciu: dr hab. Inż. Katarzyna Pernal_fot. Michał Jędrak