

„Samemu można iść szybciej, ale w grupie można zejść dalej”

Naukownicy, która łącząc naukę z biznesem, doskonale wie, czego chce. Ceni sobie konstruktywną współpracę, gdyż korzystają na tym nauka i gospodarka, a innowacje przekuwają w zyski przydatne światu. Zapraszamy do lektury rozmowy z dr Alicją Mikołajczyk z Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego, specjalizującą się w cyfrowym projektowaniu materiałów, chemikaliów i leków, wielokrotnie nagradzaną za swe osiągnięcia, w tym wpisem na Listę 50 Kobiet Roku 2024 „Forbes Women”¹



Doktor Alicja Mikołajczyk

Fot. archiwum prywatne

► **Czy zawsze chciała pani zostać naukowczynią?**

Nie zawsze wiedziałam, że zostanę naukowczynią, ale w pewnym momencie życie wskazało mi tę drogę. Kiedy miałam dwanaście lat, przeżyłam dramatyczny wypadek. Gdy wracałam rowerem ze szkoły, potrącił mnie pijany kierowca. Walka o życie i długie lata rehabilitacji pokazały mi, jak krucha i delikatna, a zarazem silna i mocna potrafi być ludzka natura. To doświadczenie obudziło we mnie głęboką ciekawość dotyczącą ludzkiego ciała, medycyny oraz technologii, które mają moc ratowania życia. Wtedy zrozumiałam, że nauka może nie tylko odpowiadać na najtrudniejsze pytania, ale także tworzyć rozwiązania zmieniające rzeczywistość.

Moja fascynacja nauką rosła wraz z wiekiem, przekształcając się w życiową pasję, a w końcu – w misję. Każdy projekt, każde wyzwanie zawodowe traktuję jako szansę na poszukiwanie tego, co jeszcze nieodkryte. Moim marzeniem jest pozostawienie po sobie dziedzictwa, które wpłynie na jakość życia przyszłych pokoleń, pomoże budować świat bardziej odporny na kryzysy, a także świat pełen nadziei i nowych możliwości. Nauka stała się moją osobistą drogą do zmieniania świata na lepsze. Odkąd zrozumiałam, że to z nią chcę kroczyć przez swoje zawodowe życie, widziałam w sobie naukowczynię i badaczkę.

► **Dlaczego chemia i jak zaczęło się pani zainteresowanie chemoinformatyką?**

Moja fascynacja chemią wywodzi się właśnie z tego wspomnianego przed chwilą pragnienia zmieniania rzeczywistości – tworzenia lepszego świata dzięki nauce. Chemia jako nauka łącząca ba-

dania podstawowe z aplikacyjnymi otwiera ogromne możliwości w projektowaniu innowacyjnych materiałów i technologii, które odpowiadają na najpilniejsze wyzwania współczesności. Jednak chemoinformatyka nie była moją miłością od pierwszego wejrzenia. O ile chemia fascynowała mnie od lat dziecięcych, o tyle nanotechnologię i chemoinformatykę zainteresowałam się dopiero w trakcie studiów magisterskich. Nasze drogi połączył zbieg okoliczności. W ramach pracy magisterskiej pisanej w Zakładzie Krystalografii Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego zajmowałam się syntezą oraz pomiarem kryształów. Poszukując metod umożliwiających kontrolowanie wzrostu kryształów, natrafiłam na wykład Richarda Feynmana, który przedstawiał wizję manipulowania strukturą chemiczną na poziomie pojedynczych atomów. Od tego czasu spędziłam wiele godzin, zgłębiając wiedzę w zakresie możliwości nanomateriałów oraz potencjalnych zagrożeń związanych z ich rozwojem. Tak znalazłam publikację z czasopisma „Nature Nanotechnology” dotyczącą nanotoksykologii komputerowej, opublikowaną przez polski zespół badawczy, na czele którego stał profesor Tomasz Puzyn, mój późniejszy mentor i promotor rozprawy doktorskiej. Sprawy tak się potoczyły, że rok później zostałam laureatką konkursu o stypendium przyznawane w ramach 7. Programu Ramowego UE „Building bridges between specialists on computational and empirical risk assessment of engineered nanomaterials (NanoBRIDGES)” oraz uczestniczką projektu „Nano-PUZZLE – modelling properties, interactions, toxicity and environmental behaviour of engineered nanoparticles” kierowanego przez profesora Puzyna i rozpoczęłam

przygodę z nanotechnologią w ramach Stacjonarnych Studiów Doktoranckich Chemii i Biochemii przy Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego.

Wyobrażam sobie chemoinformatykę jako swoistą sztukę projektowania. Niczym architekt tworzę modele przyszłych leków czy materiałów, jeszcze zanim powstaną w rzeczywistości. Taki cyfrowy warsztat pozwala nie tylko oszczędzać czas i zasoby, ale także minimalizować wpływ nowych rozwiązań na zdrowie człowieka i środowisko naturalne w całym cyklu życia produktu. Inspiruje mnie świadomość, że dzięki mojej pracy mogę przeciwdziałać globalnym wyzwaniom, takim jak zmiany klimatyczne, pandemie czy choroby związane z zanieczyszczeniem środowiska. Chemia i chemoinformatyka dają mi narzędzia do tworzenia innowacji, które służą zarówno ludziom, jak i planecie. To jest moja pasja i mój cel.

► **Studia licencjackie ukończyła pani na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach, studia magisterskie na Uniwersytecie Wrocławskim, a stopień doktora nauk chemicznych uzyskała pani pod kierunkiem profesora Tomasza Puzyna na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. W międzyczasie odbyła pani wiele staży naukowych w USA i Ekwadorze. To prawdziwa podróż naukowa przez kraj i kontynenty. Na co zwracać uwagę na początku kariery naukowej, jeszcze podczas studiów? Jak pokierować karierą w przemysłany sposób?**

To prawda, uważam, że droga i podróż są ważne. W dzisiejszym świecie sukces często definiujemy przez pryzmat osiągnięć, statusu czy pozycji zawodowej.

Tymczasem, jeśli przyjrzymy się najbardziej spełnionym osobom, zauważymy, że to właśnie ich droga – historia ich prób, potknięć i wytrwałości – stanowi inspirację. Większość ludzi skupia się na celu, a nie na tożsamości. Jeżeli nie identyfikujemy się z tym, co chcemy robić, osiągnięcie celu będzie trudne, ponieważ cel wymaga wytrwałości, konsekwencji i odpowiednich nawyków. Skupiając się wyłącznie na tym, co chcemy osiągnąć, tracimy z oczu bogactwo doświadczeń, które towarzyszy nam każdego dnia. Doświadczeń, które dają nam szansę dotrzeć do miejsc, w których chcemy być.

Na początku kariery naukowej kluczowe jest, aby wybrać temat, który naprawdę nas fascynuje. Pasja i głód wiedzy są najlepszymi motywatorami prowadzącymi do długoterminowego zaangażowania. Jednocześnie warto pamiętać, że ludzie, których spotykamy na swojej drodze, odgrywają ogromną rolę w naszym rozwoju. Współpraca w zespole umożliwi osiągnięcie celów, które samodzielnie byłyby poza naszym zasięgiem.

Moja własna podróż naukowa – od studiów licencjackich na Uniwersytecie Śląskim, przez studia magisterskie na Uniwersytecie Wrocławskim, po doktorat pod kierunkiem profesora Tomasza Puzyna na Uniwersytecie Gdańskim i staż w Stanach Zjednoczonych w Interdisciplinary Center for Nanotoxicity – była pełna wyzwań oraz inspirujących spotkań. Staże naukowe w USA i Ekwadorze nauczyły mnie, jak cenne jest poznawanie różnych środowisk badawczych i nawiązywanie międzynarodowych kontaktów. To właśnie te doświadczenia pozwoliły mi spojrzeć na naukę jako na globalną przestrzeń współpracy i wymiany wiedzy. Podsumowując, kariera naukowa to nie tylko osiągnięcie kolejnych celów, ale przede

wszystkim pielęgnowanie pasji, ciągły rozwój, determinacja, pokora i otwartość na naukę płynącą z każdej napotkanej przeszkody. Najlepszym przewodnikiem w tej podróży są ciekawość i ludzie, którzy podzielają nasze aspiracje i wartości, ponieważ samemu można iść szybciej, ale w grupie można zejść dalej.

► Czy kiedykolwiek podczas swojej kariery odczuła pani, że mężczyźni na pani miejscu byłoby łatwiej?

Zdarza się, że słyszę pytanie, czy w moim zawodzie mężczyźni miałby łatwiej. Nie da się ukryć, że w niektórych sytuacjach nadal istnieją nierówności, zwłaszcza gdy mówimy o stanowiskach najwyższego szczebla. Dla mnie jednak wyzwania, które pojawiają się w związku z tym, nigdy nie były przeszkodą nie do pokonania – stały się raczej inspiracją i motywacją do działania. Patrząc na to w szerszym kontekście: jeszcze sto sześćdziesiąt lat temu kobiety miały bardzo ograniczony dostęp do świata nauki, a pięćdziesiąt lat temu komputery były dostępne jedynie dla wybranych. Dziś obserwujemy rewolucję – badania coraz częściej przenoszą się z laboratoriów do przestrzeni wirtualnej, gdzie fizyczne bariery tracą znaczenie.

Współczesna nauka otwiera drzwi kobietom, które stają się liderkami, inspirującymi i zmieniającymi przyszłość dzięki swojej empatii, determinacji i wizji. Nie da się ukryć, że różnice płciowe nadal istnieją, ale to właśnie dlatego tak istotne jest, by kobiety w nauce działały z determinacją i konsekwencją, łamały schematy i torowały drogę kolejnym pokoleniom.

Inspiruje mnie myśl, że każdy mój krok może pomóc innym – udowodnić, że płęć nie definiuje

naszych możliwości, a sukces zależy od pasji, wytrwałości i wiary w siebie.

► Jeśli miałyby pani wybrać trzy cechy, które młodej naukowcy ni mogłyby pomóc odnieść sukces w nauce – jakie by one były?

Determinacja, konsekwencja w działaniu – ja to nazywam „upartością” – i pokora, cierpliwość.

► Dzisiaj w Pracowni Chemo-informatyki Środowiska na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego zamiast kolekcji próbek i wszelkiego rodzaju laboratoryjnej aparatury pomiarowej wystarczy pani komputer przeliczający dane na podstawie złożonej matematyki i algorytmów. Dzięki niemu bada pani potencjalnie szkodliwe związki chemiczne. Wiele z nich jest przydatnych człowiekowi, ale w dłuższej perspektywie ich działanie może być szkodliwe dla naszego zdrowia i środowiska. Sprawdza pani, czy te przydatne związki nie będą też z czasem szkodliwe? Jak wygląda proces takiego badania?

Dzięki komputerowi możliwe jest przeprowadzenie zaawansowanych analiz, które pozwalają ocenić potencjalne ryzyko związane z działaniem związków chemicznych jeszcze przed ich fizyczną syntezą. Tak samo jesteśmy w stanie komputerowo zaprojektować związki, czy innowacyjne i zaawansowane materiały o pożądanych z przemysłowego punktu widzenia właściwościach na wczesnym etapie projektowania. Wprowadzamy tym samym ideę bezpiecznego procesu projektowania zrównoważonego produktu [ang. Safe and Sustainability-by-Design, SSbD – przyp. S.D.K.]. Proces badania tych związków opiera

się na integracji metod uczenia maszynowego, sztucznej inteligencji i chemii kwantowej.

Narzędzia komputerowe umożliwiają generowanie wirtualnych bibliotek danych składających się z setek tysięcy potencjalnych związków chemicznych o różnych strukturach i właściwościach, w mikro-, makro- czy nanoskali. W wyniku ich analizy wybierane są związki optymalne, czyli takie, które łączą pożądane właściwości z minimalnym ryzykiem dla zdrowia i środowiska. Opracowane algorytmy pozwalają na wczesną ocenę ryzyka chemicznego dla nowych, często jeszcze nieistniejących materiałów, chemikaliów czy leków. Proces ten wpisuje się w wysiłki Komisji Europejskiej, m.in. rozporządzenie REACH (EC 1907/2006) oraz aneks dotyczący nanomateriałów obowiązujący od roku 2020, zmierzające do egzekwowania procedur wymagających od producenta substancji chemicznej oszacowania jej potencjalnie negatywnego wpływu na zdrowie człowieka i środowisko przyrodnicze jeszcze przed wprowadzeniem danej substancji na rynek. Innymi słowy, może wspierać proces rejestracji nowych substancji chemicznych i jednocześnie zapobiegać wprowadzaniu na rynek substancji o potencjalnie szkodliwym działaniu. Innowacyjne podejście w znaczący sposób optymalizuje proces projektowania chemicznego, redukując liczbę, czas i koszty badań eksperymentalnych. Co więcej, narzędzia te umożliwiają ograniczenie konieczności przeprowadzania testów toksykologicznych na zwierzętach, stwarzają więc etyczną, wydajną i mniej kosztowną alternatywę w procesie rejestracji substancji chemicznych. To kompleksowe i nowatorskie podejście nie tylko przyspiesza proces odkrywania nowych mate-

riałów i leków, ale także przyczynia się do ochrony zdrowia ludzi oraz środowiska naturalnego w całym cyklu życia produktu, w duchu zrównoważonego rozwoju oraz założeń Przemysłu 4.0 i Europejskiego Zielonego Ładu.

► Za swoje badania otrzymała pani w zeszłym roku stypendium programu L'Oréal-UNESCO Dla Kobiet i Nauki w kategorii habilitacyjnej, za pracę pt.: *Metody uczenia maszynowego, sztucznej inteligencji i modelowania molekularnego jako narzędzia wspierające proces zrównoważonego projektowania bezpiecznych, zaawansowanych i innowacyjnych materiałów, chemikaliów i leków. To z pewnością zwieńczenie dotychczasowych sukcesów. W tym miejscu chcę zapytać o pozostałe nagrody, czy utrzymuje pani z nimi znajomość i czy kobiety w świecie nauki wspierają się na co dzień?*

Dołączenie do grona stu dwudziestu dziewięciu stypendystek programu L'Oréal-UNESCO Dla Kobiet i Nauki jest dla mnie nie tylko ogromnym wyróżnieniem, ale także symbolicznym zwieńczeniem wielu lat pracy i poświęcenia. Celem programu jest wyróżnienie osiągnięć naukowiec, które dowodzą, że nauka potrzebuje kobiet – ich odwagi, determinacji i nowatorskiego spojrzenia. Bycie częścią tego prestiżowego grona to dla mnie źródło motywacji do dalszego działania i eksplorowania niezbadanych jeszcze naukowych obszarów. To stypendium otworzyło przede mną nowe możliwości – od nawiązania cennych kontaktów w świecie nauki, po inspirujące spotkania z wyjątkowymi kobietami, które swoją pracą i postawą zmieniają rzeczywistość.

Jednym z najbardziej wyjątkowych momentów było znalezienie się na Liście 50 Kobiet Roku 2024 „Forbes Women” w kategorii nauka. To wyróżnienie, które otrzymałam obok takich osobistości jak Iga Świątek czy Olga Tokarczuk, jest dla mnie dowodem na to, że wytrwałość i pasja mogą przebić każdy szklany sufit.

Wracając do pytania – konkurs L'Oréal-UNESCO nie tylko podkreśla znaczenie pracy kobiet w nauce, ale także tworzy przestrzeń do budowania relacji i wzajemnego wsparcia. Wierzę, że siła kobiet tkwi we współpracy i solidarności, które mogą stać się motorem zmian, również w środowisku naukowym. Niestety, nadal obserwuję, że kobiety w nauce często zmagają się z brakiem wiary w swoje możliwości czy ograniczeniami wynikającymi z przestarzałych schematów. Jednak doświadczenia wyniesione z tego programu pokazują, że wspierając się nawzajem, możemy przekraczać granice i otwierać nowe ścieżki dla kolejnych pokoleń naukowców, bo jak brzmi dewiza programu: „Świat potrzebuje nauki. Nauka potrzebuje kobiet”.

► Rok wcześniej została pani ogłoszona Rising Star in Materials Science 2023, czyli Wschodzącą Gwiazdą Materiałoznawstwa. Spośród ponad trzystu nominowanych wybrano siedemnaścioro młodych naukowców i naukowczyń, których badania mogą zmieniać świat. Celem pani badań, jak wspominałam wcześniej, jest opracowanie modeli obliczeniowych wspieranych przez sztuczną inteligencję do projektowania nowych chemikaliów. W jaki sposób sztuczna inteligencja może się przyczynić do przekształcenia przemysłu Unii Europejskiej w bardziej odporny i konkurencyjny w skali globalnej?

Bycie wyróżnioną jako Rising Star in Materials Science 2023 to dla mnie ogromny zaszczyt i zobowiązanie. Wybór spośród ponad trzystu nominowanych i dołączenie do grona siedemnaściorga młodych naukowców i naukowiek, których badania mogą zmieniać świat, ponownie utwierdza mnie w przekonaniu o znaczeniu mojej pracy. Celem moich badań jest właśnie opracowanie zaawansowanych modeli obliczeniowych wspieranych przez sztuczną inteligencję, które mogą przekształcić przemysł chemiczny Unii Europejskiej, czyniąc go bardziej odpornym i konkurencyjnym na globalnej arenie. Tak jak wspominałam wcześniej, zintegrowanie technik uczenia maszynowego, sztucznej inteligencji i metod chemii kwantowej umożliwi generowanie i przeszukiwanie wirtualnie wygenerowanych setek tysięcy związków chemicznych o różnej strukturze i właściwościach w celu wyboru optymalnych związków do dalszych badań eksperymentalnych. Liczba badań nie wpływa przy tym na wzrost kosztów procesu. W efekcie zsyntezowane i przebadane zostaną jedynie optymalne związki chemiczne, co znacząco podnosi efektywność procesu projektowania.

Opracowane algorytmy wpisują się w najbardziej priorytetowe potrzeby przemysłu chemicznego w Polsce oraz w pozostałych krajach Unii Europejskiej i stanowią element czwartej rewolucji przemysłowej, której jednym z celów jest digitalizacja przemysłu.

Dzięki wykorzystaniu opracowanych algorytmów AI/ML do wirtualnego projektowania możliwe jest zredukowanie kosztów i czasu badań laboratoryjnych oraz całkowite wyeliminowanie eksperymentów z udziałem zwierząt laboratoryjnych, których śmiertelność wynosi średnio od 12 mln rocz-

nie w Europie do około 100 mln w Stanach Zjednoczonych. W wyniku zastosowania tego innowacyjnego podejścia opracowanie nowego produktu chemicznego przy zachowaniu procedur oceny ryzyka staje się szybsze i tańsze. Digitalizacja procesu oceny ryzyka chemicznego – zwłaszcza w okresie kryzysu ekonomicznego w Europie spowodowanego pandemią COVID-19 – zwiększa szansę na sukces wprowadzanych regulacji prawnych, rejestracji i wdrażania na rynek konsumencki nowych produktów w sektorze kosmetycznym, farmaceutycznym czy chemicznym zgodnie z założeniami rozporządzenia REACH Komisji Europejskiej.

► Pani badania zaistnieją w praktyce gospodarczej dla dobra społeczeństwa i na rzecz inteligentnego rozwoju. Te prowadzone w ramach projektu NanoCARRIERS finansowane przez Narodowe Centrum Nauki prezentowała pani podczas konferencji nanomedycznej „ChinaNanomedicine 2023” przebiegającej pod hasłem „Nano-medicine: Discovery and Translation” w Guangzhou w Chinach. Opierały się one na hipotezie, że integracja metod modelowania molekularnego z metodami uczenia maszynowego umożliwi wspomnianą przed chwilą przez panią redukcję czasu i kosztów prowadzonych badań oraz zwiększy efektywność nośników leków projektowanych na bazie nanocząsteczek. Wzmocni to potencjał tych badań za pomocą komputera. Metoda uczenia maszynowego jako dziedzina sztucznej inteligencji wciąż jest jednak rzadko wykorzystywana w medycynie. To ma szansę się zmieniać, tak jak błyskawicznie zmienia się świat wokół nas. Czy w przyszłości owa metoda może

wyprzeć klasyczne metody, czy raczej będzie z nimi współdziałała?

Uczestniczymy w procesie, w którym chemia wychodzi z tradycyjnych laboratoriów i stopniowo przenosi się do przestrzeni badań wirtualnych. Innymi słowy, stopniowo zastępujemy myszy laboratoryjne myszami komputerowymi. Natomiast należy pamiętać, że dziś nie jesteśmy w stanie w pełni wyeliminować badań eksperymentalnych i testów z wykorzystaniem organizmów kręgowych, na przykład myszy czy chomików. Jeśli chodzi o skuteczność, zawsze porównujemy uzyskane wyniki z eksperymentem, który jest dla nas punktem odniesienia. Chociaż w historii znane są przypadki, że to właśnie dzięki metodom komputerowym udało się wykryć błędny wynik uzyskany eksperymentalnie. Opracowywane algorytmy mogą być stosowane w badaniach przesiewowych do szybkiego screeningu i wstępnej weryfikacji (na etapie badań przedklinicznych) bezpieczeństwa nanocząstek o zastosowaniach medycznych, na przykład nanocząstek wykorzystywanych jako nośniki leków lub materiału genetycznego (RNA). Ma to duże znaczenie zwłaszcza w kontekście obserwowanego zagrożenia nowo pojawiającymi się chorobami, takimi jak COVID-19, czy niwelowania chorób o podłożu środowiskowym.

Wspomniała pani o projekcie NanoCARRIERS – opracowanie nowych strategii leczenia chorób neurodegeneracyjnych jest obecnie jednym z najtrudniejszych i najbardziej kosztownych zadań dla farmacji. Według statystyk koszt wprowadzenia nowego leku w perspektywie pięcioletnich badań wynosi ponad 1,4 mld USD, z czego 30,8% stanowią badania wstępne i badania przedkliniczne –



Doktor Alicja Mikołajczyk

Fot. Anna Wensierska

in vitro i *in vivo*. W przypadku leków ośrodkowego układu nerwowego zaledwie od 3% do 5% substancji rozważanych jako leki trafia na rynek, ponieważ większość z nich nie jest w stanie skutecznie przekraczać bariery krew-mózg.

Na polskim rynku farmaceutycznym proces opracowywania nowych leków, ze względu na bariery kapitałowe, realizowany jest głównie w partnerskim modelu biznesowym. Innowacyjne przedsiębiorstwa biotechnologiczne, na przykład Selvita, prowadzą badania jedynie do etapu badań

przedklinicznych. Kolejne fazy projektu, w tym badania kliniczne, prowadzone są w partnerstwie z jedną ze światowych firm farmaceutycznych – na przykład AstraZeneca, Pfizer, Roche, Sanofi. Firma ta finansuje dalsze badania, zazwyczaj w formie płatności z góry i grantów badawczych, co znacząco ogranicza szanse polskich firm biotechnologicznych. Zakładając, że koszt modelowania byłby co najmniej o 50% niższy niż koszt eksperymentów (liczba syntetyzowanych i testowanych substancji zmniejszyłaby się od

50% do 80%), spowodowałoby to znaczne oszczędności dla polskiego przedsiębiorcy. W takich przypadkach, gdzie potrzebny byłby niższy poziom inwestycji zewnętrznych, a inwestor rozpoczynałby finansowanie badań na późniejszych etapach, polski przedsiębiorca mógłby wynegocjować znacznie lepsze warunki umów partneringowych z dużymi koncernami farmaceutycznymi, co przełożyłoby się na wzrost jego dochodu. Średni czas trwania badań przedklinicznych, czyli badań od syntezy do startu klinicznego, wy-

nosi 31,2 miesiąca. Zakładając, że czas potrzebny na ten etap skróci się o 50% w efekcie zastosowania zestawu narzędzi komputerowych, opóźnienie między fazą przedkliniczną a kliniczną zmniejszy się z 5 lat do około 4,5 roku bez zwiększania kosztów. Zwiększy to konkurencyjność przedsiębiorstwa korzystającego z narzędzi AI/ML na rynku światowym. Wreszcie, zamierzamy zwiększyć wskaźnik sukcesu fazy klinicznej rozważanych leków ośrodkowego układu nerwowego do tego samego poziomu, co wskaźnik sukcesu klasycznych chemikaliów, projektując odpowiednie nanonośniki zdolne do transportu substancji czynnej przez barierę krew-mózg. Prawdopodobieństwo sukcesu w fazie przedklinicznej zostałoby dodatkowo zwiększone w wyniku zastosowania obliczeń o dużej przepustowości.

► Współpracuje pani z siedemdziesięcioma instytucjami na pięciu kontynentach i zajmuje się digitalizacją chemii jako współwłaścicielka i specjalistka ds. badań i rozwoju w spółce spin-off QSAR Lab, założonej przez pracowników Wydziału Chemii UG z profesorem Tomaszem Puzynem na czele. Czy wejście w świat biznesu było pani pomysłem, czy też naturalną konsekwencją pracy naukowej we współpracy z innymi?

W 2016 roku razem z Uniwersyte-tem Gdańskim założyliśmy QSAR Lab sp. z o. o. – spółkę typu spin off, która jest formą komercjalizacji pośredniej naszej działalności. Na czele spółki stoi profesor Tomasz Puzyn. QSAR Lab od początku swej działalności przenosi chemię z tradycyjnych laboratoriów do przestrzeni wirtualnej. Oferta firmy obejmuje szereg specjalistycznych usług z zakresu che-

mii obliczeniowej i toksykologii. Za pomocą metod *in silico*, analizy danych, uczenia maszynowego i sztucznej inteligencji możemy zwiększyć wydajność prowadzonych badań, obniżyć ich koszt i wprowadzić je na wyższy stopień innowacyjności. Wejście w świat biznesu było dla mnie naturalną konsekwencją pracy naukowej oraz wynikiem ścisłej współpracy z innymi naukowcami i instytucjami.

Uważam, że badania podstawowe stanowią fundament rozwoju nauki, ale ich komercjalizacja jest niezbędna, aby przekładać wyniki tych badań na realne korzyści dla przemysłu i społeczeństwa. QSAR Lab jest dowodem na to, że nauka i biznes mogą współistnieć w harmonii, tworząc przestrzeń dla innowacji i zrównoważonego rozwoju.

► Jakie są pani najbliższe naukowe plany?

Moim naukowym marzeniem jest pełna digitalizacja przemysłu chemicznego, farmaceutycznego, nanotechnologii i inżynierii materiałowej i procesowej, innymi słowy – transfer procesu projektowania z tradycyjnych laboratoriów do przestrzeni wirtualnej. Chciałabym wdrożyć oprogramowanie, które poprzez połączenie metod chemii kwantowej, biologii molekularnej, technik uczenia maszynowego i sztucznej inteligencji umożliwiłoby pełen proces digitalizacji procesu projektowania, zwłaszcza oceny ryzyka chemicznego, jakie mogą stwarzać nowo projektowane zaawansowane i innowacyjne materiały [ang. Innovative Advanced Materials, IAMs – przyp. S.D.K.] względem zdrowia człowieka i środowiska naturalnego na wczesnym etapie badań – przed wprowadzeniem produktu na rynek konsumencki – zgodnie

z rozporządzeniami REACH (EC 1907/2006) czy FDA.

Wierzę, że dzięki integracji sztucznej inteligencji, modelowania molekularnego, chemii kwantowej i biologii molekularnej możemy stworzyć narzędzia, które nie tylko przyspieszą badania nad nowymi lekami i materiałami, ale również znacząco zwiększą ich bezpieczeństwo i zrównoważony rozwój. Chciałabym, aby moje rozwiązania pomagały firmom szybciej wprowadzać na rynek innowacyjne, zaawansowane, bezpieczne dla zdrowia i środowiska produkty i minimalizować jednocześnie potrzebę kosztownych i czasochłonnych badań eksperymentalnych z wykorzystaniem wątpliwych etycznie testów na zwierzętach laboratoryjnych. Optymalizacja procesu projektowania umożliwiłaby redukcję liczby, czasu i kosztów niezbędnych badań eksperymentalnych, a także usprawniłaby proces rejestracji substancji chemicznych.

Tradycyjny proces projektowania i oceny ryzyka nowych leków, kosmetyków, materiałów czy chemikaliów wiąże się z wysokimi kosztami, długim czasem badań i, tak jak już mówiłam, śmiercią w ciągu roku od 12 mln zwierząt w Europie do 100 mln w USA. Dlatego marzę o wdrożeniu platformy komputerowej, która z jednej strony umożliwi wirtualne projektowanie i wstępną weryfikację funkcjonalności i bezpieczeństwa zaawansowanych materiałów, na przykład nanocząstek o zastosowaniach medycznych wykorzystywanych jako nośniki leków lub materiału genetycznego (RNA) na wczesnym etapie badań przedklinicznych, a z drugiej strony – umożliwi ocenę ryzyka chemicznego, jakie mogą stwarzać nowo projektowane zaawansowane i innowacyjne materiały w całym cyklu życia produktu, jeszcze przed

wprowadzeniem tego produktu na rynek konsumencki.

Biorąc pod uwagę, że pięćdziesiąt lat temu nie było tak rozwiniętych technologicznie komputerów, trzydzieści lat temu nie mieliśmy powszechnie dostępnego internetu, pragnę, aby w perspektywie kolejnych trzydziestu czy pięćdziesięciu lat proces zrównoważonego i wirtualnego projektowania nowych, bezpiecznych, innowacyjnych, zaawansowanych materiałów, chemikaliów oraz leków ukierunkowanych na konkretne zagrożenia i potrzeby społeczeństwa stał się w pełni możliwy.

Chciałabym odegrać znaczącą rolę w digitalizacji przemysłu w Europie prowadzącej do rewolucji przemysłowo-technologicznej, a w konsekwencji – do stworzenia nowoczesnej, niezależnej, cyfrowo zintegrowanej, neutralnej dla klimatu, zrównoważonej, a jednocześnie odpornej na nowo pojawiające się zagrożenia gospodarki. Moim marzeniem jest możliwość projektowania leków i materiałów, które będą bezpieczne dla zdrowia człowieka i środowiska naturalnego w całym cyklu życia produktu.

► Doskonale pani wie, czego chce! To robi wrażenie i może być źródłem inspiracji. Jakie naukowczynie były i są dla pani wzorem?

Moją największą inspiracją była i zawsze będzie moja mama. Jej siła, determinacja i zdolność do podnoszenia się w obliczu trudności nauczyły mnie, że ciężką pracą i wytrwałością można sta-

wić kolejne kroki, pokonać każdą przeszkodę, a co najważniejsze – nie cofać się. Swoją postawą pokazała mi, że niemożliwe nie istnieje, że nie należy się poddawać, a bezinteresowne pomaganie innym, niezależnie od rangi czy pozycji społecznej, jest jednym z fundamentów życia. Nie znam drugiej tak dobrej, pracowitej i jednocześnie tak silnej kobiety.

Jeżeli chodzi o naukowczynie, inspirują mnie kobiety, które nie tylko przełamują bariery w nauce, ale także zmieniają świat właśnie swoją odwagą i determinacją. Jednym z moich wzorów jest Maria Skłodowska-Curie, która swoją niezwykłą pracą i niezłomnością utworzyła drogę kobietom w nauce. To niezwykła badaczka, która jako pierwsza kobieta otrzymała Nagrodę Nobla i to aż dwukrotnie, w różnych dziedzinach nauki. Jej niezłomność, pasja do odkrywania nieznanego i poświęcenie na rzecz nauki pokazują, że determinacja i praca mogą przełamać wszelkie bariery. Współczesnym wzorem są dla mnie Jennifer Doudna i Emmanuelle Charpentier, które dzięki odkryciu technologii CRISPR-Cas9 zrewolucjonizowały biologię molekularną, dając naukowcom narzędzie do edycji genomu z niespotykaną precyzją. Ich praca otworzyła nowe możliwości w leczeniu chorób genetycznych i w badaniach nad rozwojem nowych terapii. Podziwiam ich zdolność do łączenia zaawansowanej wiedzy naukowej z praktycznym zastosowaniem, co przypomina mi o kluczowej roli interdyscyplinarności w dzisiaj-

szej nauce. Te niezwykle kobiety są dla mnie dowodem na to, że odwaga, wytrwałość i wizja są niezbędne do przekraczania granic wiedzy i kształtowania przyszłości nauki na skalę globalną.

► Co najbardziej lubi pani w swojej pracy?

Najbardziej cenię w swojej pracy to, że mogę łączyć pasję do nauki z praktycznym zastosowaniem wyników badań w biznesie, tworząc innowacje, które realnie zmieniają życie ludzi i mogą przyczynić się do stworzenia silnej i niezależnej Europy, zgodnie z założeniami Europejskiego Zielonego Ładu. Eksplorowanie nieodkrytych jeszcze obszarów nauki i przekształcanie tych odkryć w innowacyjne rozwiązania przynoszące wartość społeczną daje mi ogromną satysfakcję.

Jednocześnie, praca ze studentami i młodymi naukowcami pozwala mi dzielić się wiedzą, inspirować ich i obserwować, jak rozwijają swoje pasje. Współpraca z biznesem otwiera nowe perspektywy – pokazuje, że nauka i innowacje mogą realnie wpływać na rozwój gospodarki i poprawę jakości życia. Na koniec dodam, że wierzę, iż moja praca, łącząca pasję, edukację i praktyczną wartość nauki, pozostawi po sobie trwałe ślady.

► Dziękuję za rozmowę.

Dziękuję również.

Sylwia Dudkowska-Kafar

¹ W tej samej kategorii (nauka) została wyróżniona jeszcze jedna badaczka z Międzyuczelnianego Wydziału Biotechnologii UG i GUMed – dr hab. Danuta Gutowska-Owsiak, prof. UG, z którą wywiad mogą Państwo przeczytać w numerze „Gazety Uniwersyteckiej” z października ub.r.