

**INSTYTUT KATALIZY
I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI
im. JERZEGO HABERA
POLSKIEJ AKADEMII NAUK**



Leading National
Research Centers



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU
W ROKU 2023**



Kraków, marzec 2024

Spis treści

CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU KATALIZY I FIZKOCHEMII POWIERZCHNI im. JERZEGO HABERA POLSKIEJ AKADEMII NAUK	5
ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2023	10
SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2023:	15
DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU	21
Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju	23
Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej	29
Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury	43
Grant Rozwojowy	47
Projekty badawcze NCN „Sonata Bis”	51
Projekty badawcze NCN „Sonata”	55
Projekty badawcze NCN „Opus”	61
Projekty badawcze NCN „Sonatina”	77
Projekty badawcze NCN „Preludium Bis”	81
Projekty badawcze NCN „Preludium”	85
Projekty badawcze NCN „Beethoven Life”	91
Projekty badawcze NCN „Solar-Driven Chemistry”	95
Projekty badawcze NCN „GRIEG”	99
Projekty badawcze NCN „Miniatura”	103
Projekty badawcze NCBR „EIG CONCERT-JAPAN”	111
Projekty NCBR „TechMatStrateg”	115
Projekty NCBR „Program operacyjny Inteligentny Rozwój”	119
Projekty NCBR „TANGO”	123
Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej	127
Programy HORYZONT	131
Projekty akcji EU COST	137
Projekty strukturalne funduszy Unii Europejskiej	141
Inne międzynarodowe projekty badawcze	145
Projekty programu Erasmus+	149
Dorobek publikacyjny instytutu za rok 2023	153
PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM	155
OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ	185
UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH	187
WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH	206
SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU	207
UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE	209

CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI im. JERZEGO HABERA POLSKIEJ AKADEMII NAUK

Prowadzone badania

Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk jest jedyną instytucją naukową w Polsce specjalizującą się w interdyscyplinarnych badaniach z obszarów katalizy i fizykochemii powierzchni. Prace badawcze prowadzone przez naukowców zatrudnionych w Instytucie łączą w sobie nowoczesne narzędzia badawcze z zakresu chemii, fizyki, biotechnologii, technologii chemicznej, inżynierii materiałowej, a także mikrobiologii i medycyny. W centrum zainteresowań naukowych kadry Instytutu leży badanie molekularnych podstaw procesów katalitycznych, a także zjawisk zachodzących na granicach fazowych gaz–ciało stałe, gaz–ciecz i ciecz–ciało stałe. W ostatnich latach w Instytucie bardzo intensywnie rozwijana jest również tematyka biotechnologiczna, poświęcona polimerom biodegradowalnym, jak również szeroko rozumiana tematyka nanotechnologiczna skierowana na opracowanie nowych nanomateriałów do zastosowań diagnostycznych i terapeutycznych. W Instytucie prowadzone są zarówno teoretyczne i doświadczalne badania podstawowe, które płynnie łączą się z badaniami o charakterze stosowanym. Dzięki współpracy z otoczeniem społeczno-gospodarczym prace badawcze prowadzone w Instytucie ukierunkowane są na rozwiązywanie praktycznych, aktualnych i ważnych dla społeczeństwa problemów.

Kadra Instytutu to 125 pracowników, w tym około 85 jest bezpośrednio zaangażowanych w prowadzenie prac badawczych. Ponadto, w badaniach uczestniczy kilkudziesięciu doktorantów. W działalność badawczą Instytutu zaangażowanych jest także około 20 doktorantów. Rekrutacja w IKiFP PAN prowadzona jest zgodnie z Otwartą, przejrzystą Polityką rekrutacji opartą na merytoryce (OTM-R), wdrożoną w ramach działań „HR Excellence in Research”. Logo HR Excellence to prestiżowe wyróżnienie Komisji Europejskiej przyznawane instytucjom, które dostosowują swoją politykę kadrową do „Karty i Kodeksu” UE. Ponieważ wszystkie rekrutacje w IKiFP PAN prowadzone są przy pomocy platformy EURAXESS w efekcie systematycznie wzrasta liczba obcokrajowców wśród kadry naukowej.

Statutowa działalność badawcza Instytutu obejmuje trzy podstawowe kierunki:

1. Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju
2. Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej
3. Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

Badania nad materiałami i procesami katalitycznymi koncentrują się na poszukiwaniu innowacyjnych rozwiązań metodologicznych i rozwijaniu nowych, „inteligentnych” materiałów o dobrze zdefiniowanej strukturze, morfologii i składzie oraz właściwościach dostosowanych do konkretnych reakcji katalitycznych w kluczowych dla gospodarki i ochrony środowiska naturalnego procesach przemysłowych. Badane materiały obejmują nowe typy struktur tlenkowych, nanodispersyjne katalizatory metaliczne oraz nowe mikro- i mezoporowate nieorganiczne ciała stałe, głównie na bazie zeolitu. Praca ukierunkowana jest na zastosowanie w przetwarzaniu Procesy katalityczne będące przedmiotem badań, reakcje selektywnego utleniania węglowodorów, selektywnego uwodornienia surowca bioodpadowego oraz aktywacji małych cząsteczek, wpisują się w nurt „zielonej chemii” i są optymalizowane pod kątem obniżenia energochłonności i eliminacji lub ograniczenia ilości niepożądanych produktów ubocznych. Bardzo prężnie rozwijającym się kierunkiem badań są eksperymentalne i teoretyczne prace dotyczące procesów katalitycznego działania enzymów i ich zastosowania w formie izolowanych białek bądź mikroorganizmów do

produkcji związków chemicznych o wysokiej wartości. Synergiczne użycie metod teoretycznych i eksperymentalnych pozwala opisać mechanizmy katalitycznego działania badanych układów na poziomie molekularnym i opracowywać użyteczne bio-katalizatory o wysokim potencjale wdrożeniowym. Przykładem jednego ze strategicznych projektów realizowanych w Instytucie jest prototyp biorafinerii, który, wykorzystując proces fermentacji przy udziale odpowiednio dobranych mikroorganizmów, prowadzi do produkcji bioplastików o bardzo wysokim potencjale aplikacyjnym. Ponadto biodegradowalne biopolimery badane są pod kątem ich wykorzystywania jako źródło optycznie czystych związków chemicznych. W badaniach teoretycznych, pozwalających lepiej zrozumieć wyniki eksperymentalne i zaplanować nowe ścieżki badawcze, stosuje się połączenie metod mechaniki i dynamiki molekularnej oraz chemii kwantowej jako narzędzi określania i charakteryzowania czynników strukturalnych i elektronowych mających wpływ na ukierunkowanie i selektywność procesów chemicznych leżących u podstaw badanych procesów katalitycznych. Modelowanie prowadzi się zarówno dla modeli klasterowych katalizatorów heterogenicznych i enzymów, jak również dla periodycznych modeli ciała stałego czy wielkoskalowych modeli białkowych (techniki QM:MM i QM:MM MD).

Jednym z głównych celów prac badawczych prowadzonych w Instytucie w zakresie fizykochemii powierzchni układów zdyspergowanych jest opis zjawiska adsorpcji oraz wyjaśnienie mechanizmu tworzenia i stabilności układów zdyspergowanych (pian, emulsji, zawiesin), a także nanocząstek i cząstek koloidalnych, w celu określania mechanizmów ich wzajemnych oddziaływań. Badania w tej tematyce prowadzone są z wykorzystaniem zarówno technik eksperymentalnych (pomiar kinetyki adsorpcji lub dynamiki przepływu cząstek koloidalnych) jak i teoretycznych (symulacje procesu adsorpcji, struktury i właściwości warstw adsorpcyjnych, głównie z przy użyciu nowoczesnych narzędzi obliczeniowych angażujących metody dynamiki molekularnej). Drugi ważny i prężnie rozwijany dział badań z tego obszaru dotyczy procesów mikroenkapsulacji i zwiększania biokompatybilności materiałów, które mogą znaleźć zastosowania w nowoczesnych metodach diagnostycznych i terapeutycznych, jak również jako główny składnik nowoczesnych powłok antykorozyjnych. Ważnym aspektem jest również intensywny rozwój badań biologicznych oceniających potencjał biobójczy i cytotoksyczny otrzymywanych w Instytucie materiałów, które mogą znaleźć zastosowania w zwalczaniu mikroorganizmów lub komórek rakowych.

Rezultatami prowadzonych badań są osiągnięcia aplikacyjne obejmujące opracowanie nowych katalizatorów, rozwój narzędzi do symulacji molekularnych, wytwarzanie innowacyjnych materiałów biomedycznych, opracowywanie nowych biotechnologicznych metod syntezy leków oraz zabezpieczeń antykorozyjnych powierzchni ciał stałych. W zakresie badań podstawowych głównymi osiągnięciami Instytutu w roku 2023 było m.in. opracowanie efektywnego materiału elektrolitowego do ogniw paliwowych o obniżonej temperaturze pracy, poprzez domieszkowanie istniejącego elektrolitu atomami niklu. Opracowano nową efektywną metodologię wytwarzania drukowanych powłok na bazie Ni-Ag NPs poprzez zastosowanie procesu spiekania w niskiej temperaturze, w celu uniknięcia destrukcji wrażliwych temperaturowo podłoży, przy jednoczesnym wykorzystaniu tuszy o niskiej cenie. Badania wpisywały się w trend rosnącego zainteresowania produkcją ścieżek przewodzących do tzw. „elastycznej” drukowanej elektroniki z zastosowaniem tuszów na bazie nanocząstek (NPs) metali. W zakresie badań o charakterze aplikacyjnym należy wymienić dalsze udoskonalenia zintegrowanej platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie kulturowym HERIE, w której zaimplementowano kolejny moduł na podstawie opracowanego kompleksowego i efektywnego modelu osiadania cząstek pyłu na powierzchniach wewnętrznych w zabytkowych budynkach, biorąc pod uwagę różnorodne mechanizmy osadzania i właściwości powierzchni. Wykazano, że istniejące przekonanie o możliwości znacznego ograniczenia depozycji cząstek pyłu poprzez ogrzanie powierzchni nie jest prawdziwe dla typowych powierzchni architektonicznych. Model pogłębia wiedzę na temat jednego z kluczowych zagrożeń środowiskowych dla wnętrz zabytkowych i cennego wyposażenia wnętrz, dostarczając istotnych

wskazówek dla konserwatorów i zarządców obiektów zainteresowanych oceną i łagodzeniem zagrożeń dla różnych typów wnętrz zabytkowych.

Kształcenie

W roku 2023 zakończyły się utworzone w 2017 roku, Środowiskowe Studia Doktoranckie prowadzone konsorcjum złożone z pięciu jednostek naukowych: koordynatorem projektu był Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, partnerami zaś: Instytut Farmakologii im. Jerzego Maja PAN, Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN, Wydział Chemii UJ i Wydział Lekarski UJ CM. Środowiskowe Studia Doktoranckie InterDokMed „Interdyscyplinarność dla medycyny innowacyjnej” finansowane były ze środków Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój (POWER). Tematyka realizowanych w rozpraw doktorskich, wpisywała się tematykę zagadnień kluczowych dla gospodarki i społeczeństwa, wspierających innowacyjność kraju i zapewniających możliwość transferu/komercjalizacji rezultatów studiów doktoranckich. Tematy realizowane na styku nauk ścisłych i medycznych skupiały się na poszukiwaniu nowych materiałów do zastosowań medycznych bądź farmakologicznych, badaniach mechanizmów działania już istniejących leków przy zastosowaniu nowoczesnych technik fizykochemicznych stosowanych w naukach ścisłych, poznanie potencjalnych molekularnych mechanizmów działania białek w procesach chorobowych. Podstawą tych prac były wzajemnie się uzupełniające badania modelowe jak i badania na zwierzętach doświadczalnych i w oparciu o materiał kliniczny, pobrany od pacjentów.

Finalnie 44 osoby obroniły rozprawę doktorską i uzyskały stopień doktora w tym 18 interdyscyplinarnych rozpraw doktorskich zostało wyróżnionych. W ramach projektu powstało 275 publikacji, 14 rozdziałów w książkach, 39 popularnonaukowych i publikacji pokonferencyjnych. Doktoranci byli współautorami 240 komunikatów konferencyjnych i 372 plakatów.

Z dniem 31 października 2023 roku zakończono również realizację projektu FCB finansowanego ze środków Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój (POWER) Środowiskowe Studia Doktoranckie FCB „Fizyczne, chemiczne i biofizyczne podstawy nowoczesnych technologii i inżynierii materiałowej”. Interdyscyplinarne studia doktoranckie były koordynowane przez Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej (WFiIS) Akademii Górniczo-Hutniczej (AGH) z udziałem partnerskim 4 instytucji: Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki (WIMiC) AGH, Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (WCh UJ), Instytutu Fizyki Jądrowej (IFJ) im. Henryka Niewodniczańskiego PAN oraz Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni (IKiFP) im. Jerzego Habera PAN w Krakowie.

Studia doktoranckie FCB posiadały interdyscyplinarny charakter. Doktoranci reprezentowali jednostki prowadzące badania w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w tym w dyscyplinach takich jak nauki chemiczne, fizyczne oraz w dziedzinie nauk inżynierijno-technicznych w dyscyplinach takich jak inżynieria materiałowa oraz inżynieria chemiczna. W ramach projektu 72 doktorantów ukończyło studia FCB, zrealizowano 62 rozprawy doktorskie, w tym liczba rozpraw doktorskich z dwoma promotorami wyniosła 40. Dorobek naukowy trzech doktorantek FCB z IKiFP PAN, obejmuje: 19 publikacji, 2 polskie zgłoszenia patentowe, 1 międzynarodowe zgłoszenie patentowe, 30 wystąpień ustnych i 21 posterów.

W 2023 roku Instytut kształcił doktorantów również w ramach szkoły doktorskiej – Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkoły Doktorskiej (KISD) we współpracy z Instytutem Fizyki Jądrowej PAN, Instytutem Farmakologii PAN, Instytutem Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN, Akademią Górniczo-Hutniczą, Instytutem Gospodarki Surowcami Mineralnymi i Energią PAN, Instytutem Gospodarki Surowcami Mineralnymi i Energią PAN, oraz w ramach szkoły doktorskiej – Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych we współpracy z Uniwersytetem Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Instytutem Agrofizyki im. Bohdana Dobrzańskiego PAN, Instytutem

Uprawy Nawożenia i Gleboznawstwa - Państwowym Instytutem Badawczym i Akademią Górniczo-Hutniczą im. Stanisława Staszica w Krakowie.

Instytut uczestniczy w europejskim programie wymiany naukowej studentów i pracowników naukowych Erasmus plus oraz w programie wspierania wymiany akademickiej PROM finansowanym przez Narodową Agencję Wymiany Akademickiej.

W 2023 roku pracownicy Instytutu opiekowali się i przekazywali swoją wiedzę ponad 60 osobom, które odbyło praktyki studenckie i staże w Instytucie.

Współpraca krajowa i międzynarodowa

Miarą wysokiej międzynarodowej pozycji Instytutu są wspólne publikacje, wystąpienia konferencyjne, wymiana naukowa, naszych pracowników i gości zagranicznych, z instytucjami zewnętrznymi.

Instytut intensyfikuje wykorzystanie swojej infrastruktury badawczej organizując wspólne laboratoria z szeregiem ośrodków badawczych: Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur, Laboratorium Elektrochemii i Fizykochemii Powierzchni, Interdyscyplinarne Centrum Nauk Fizycznych, Chemicznych i Medycznych (ICNFCM), Narodowe Laboratorium Badania Powierzchni, Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do Zastosowań w Elektronice Spinowej SPINLAB oraz Międzyinstytutowe Laboratorium Katalizy i Biotechnologii Enzymatycznej MLKBE, Narodowe Centrum Promieniowania Synchrotronowego „Solaris”, Wspólne Laboratorium zaawansowanej spektroskopii elektronowej (z PREVAC).

Instytut prowadzi szeroką współpracę międzynarodową. Działania te obejmują liczne dwustronne programy współpracy międzynarodowej, projekty badawcze kolejnych Programów Ramowych Komisji Europejskiej, a także Programów Operacyjnych: Innowacyjna Gospodarka i Kapitał Ludzki, współfinansowanych przez Komisję Europejską. W Instytucie realizowane są obecnie cztery projekty fundowane przez Europejską Radę ds. Innowacji: *IPERION HS* Integrating Platforms for the European Research Infrastructure on Heritage Science, *nanoPaInt*: Dynamics of dense nanosuspensions: a pathway to novel functional materials, *NewCat*: Teaching Lytic Polysaccharide Monooxygenases to do Cytochrome P450 Catalysis i *GoGreen*: Green Strategies to Conserve the Past and Preserve the Future of Cultural Heritage.

Instytut szczyli się wieloletnią tradycją w organizowaniu i koordynowaniu badań w zakresie katalizy i fizykochemii powierzchni w Polsce. Od ponad pięćdziesięciu lat organizuje coroczne Ogólnopolskie Kolokwia Katalityczne, które cieszą się wielką popularnością w środowisku naukowym. Pracownicy Instytutu aktywnie angażują się w organizację i współorganizację krajowych i międzynarodowych konferencji oraz spotkań roboczych. W roku 2023 uczestniczyli w organizacji 15th European Congress of Catalysis - EuropaCat-15 „A Pillar for Modern Chemistry” 27.08-01.09.2023, Prague, Czechia

O międzynarodowej pozycji Instytutu świadczą prestiżowe funkcje pełnione przez pracowników IKiFP PAN: wiceprezes EFCATS (European Federation of Catalysis Societies); członkostwo w Radzie Dyrektorów ERIC (European Colloid and Interface Society); prezydentura w ECIS (European Colloid and Interface Society); redakcja “Advance in Colloids and Interface Science”, “Current Opinion in Colloid and Interface Science”; “Colloids and Surfaces A”, “Physicochemical Problems of Mineral Processes”; członkostwo w scientific advisory board “Journal of Colloid Interface Science”, “Catalysis Letters”, “Topics in Catalysis”, “Surface Innovations” i “Innovations & Impact”.

Popularyzacja nauki

Jesteśmy przekonani, że upowszechnianie informacji o badaniach naukowych wśród społeczeństwa ma wielkie znaczenie w budowaniu społecznej aprobaty dla inwestycji dokonywanych w sferze nauki.

Każdego roku Instytut organizuje (z niewielką przerwą związaną z pandemią COVID-19) Dni Otwarte, podczas których goście mogą wysłuchać wykładów popularnonaukowych, uczestniczyć w ciekawych eksperymentach i zaznajomić się z profilem badawczym jednostki. Dni Otwarte skierowane są przede wszystkim do uczniów szkół podstawowych i ponadpodstawowych. W ubiegłym roku Dzień Otwarty odbył się 29 września 2023 r. podczas którego wygłoszono 5 wykładów, zaprezentowano 12 doświadczeń tematycznych i oprowadzono po nowo otwartym Laboratorium Rozwoju Bioprocessów do wytwarzania zaawansowanych materiałów kompozytowych. Tego dnia odwiedziło Instytut około 550 osób m.in. ze 6 szkół podstawowych i 4 liceów.

Pracownicy Instytutu biorą również czynny udział w przedsięwzięciach organizowanych przez Klaster Life-Science takich jak Life Science Open Space czy Dzień Otwarty Klastra Life-Science, a w dniach, 3-5 czerwca 2023 r., czynny udział w Kongresie "Nauka dla Społeczeństwa", który odbył się w Warszawie.

Pracownicy Instytutu regularnie promują badania naukowe w ramach szkoleń dla polskich muzealników organizowanych przez Narodowy Instytut Muzealnictwa i Ochrony Zbiorów.

Ponadto od 2015 roku Instytut organizuje coroczny konkurs o Nagrodę im Jerzego Habera na najlepszą pracę magisterką dotyczącą zagadnień katalizy a od roku 2022 konkurs o Nagrodę im. Andrzeja Pomianowskiego za najlepszą pracę magisterską dotyczącą zagadnień fizykochemii powierzchni i zjawisk międzyfazowych.

Aby być zauważalnym w społeczeństwie, Instytut od kilku lat aktywnie działa w mediach społecznościowych. Wizerunek Instytutu kreowany jest w serwisie LinkedIn oraz na Facebooku. Swoje konta posiadają także doktoranci prowadzący badania w Instytucie. Za pomocą mediów społecznościowych Instytut dostarcza najświeższe informacje i aktualności oraz informuje opinię publiczną o ofercie i najnowszych osiągnięciach.

ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2023

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju	23
1. Badania doświadczalne i obliczeniowe nad wybranymi enzymami o potencjale aplikacyjnym	25
2. Biopolimery bakteryjne jako źródło hydroksykwasów do zastosowania jako komponenty typu HBD do wytwarzania cieczy głęboko eutektycznych (DES).	26
3. Nowe perokso- oraz poliokso- związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania	27
4. Badania efektów strukturalnych i wpływu charakteru nośnika na aktywność bimetalicznych katalizatorów miedziowo-niklowych	28
Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej	29
5. Mechanizmy i kinetyka immobilizacji białek na powierzchniach ciała stałe/elektrolit: Określenie mechanizmu tworzenia koron cząsteczek albuminy ludzkiej na powierzchni nośników polimerowych oraz krzemionkowych” - kontynuacja	31
6. Fluorescencyjne monowarstwy nanoklastrów metali o kontrolowanej strukturze oraz właściwościach elektrokinetycznych otrzymywane na powierzchniach nośników koloidalnych	32
7. Właściwości fizykochemiczne i mechaniczne układów „bio”	33
8. Właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultra wysokiej próżni	34
9. Wspomagane komputerowo projektowanie nanocząstek hybrydowych do zastosowań w teranostyce nowotworowej	35
10. Określenie mechanizmów syntezy, struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach stałych	36
11. Teranostyczne nanocząstki substancji przeciwnowotworowych	37
12. Kinetyka wyciekania filmów ciekłych w warunkach dynamicznych – eksperyment i modelowanie teoretyczne	38
13. Naturalne i modyfikowane polisacharydy jako stabilizatory filmów powierzchniowych, pian i emulsji	39
14. Nowe materiały elektrolitowe do ogniw paliwowych elektrolitem ze stałego tlenu o obniżonej temperaturze pracy	40
15. Wpływ silnego odkształcenia Mg na właściwości warstw fosforanowych	41
16. Molekularne aspekty stabilności konformacyjnej białek w kontekście tworzenia superstruktur amyloidowych	42
Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury	43
17. Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki środowiska w ich otoczeniu	45

Grant Rozwojowy	47
18. Zeolity o strukturze fojazytu zawierające miedź jako modyfikatory materiałów wybuchowych opartych na ANFO	49
Projekty badawcze NCN „Sonata Bis”	51
1. Synergistyczne efekty mieszanych roztworów bit-surfaktantów w stabilności filmów ciekłych w warunkach dynamicznych- badania podstawowe o potencjale aplikacyjnym we flotacyjnym procesie separacji	53
2. Topologia spotyka magnetyzm: związki na bazie Sn dla sterowanych magnetyzacją przejść topologicznych (TopoTin)	54
Projekty badawcze NCN „Sonata”	55
1. Od pojedynczej cząsteczki do inteligentnego materiału - zrozumienie tworzenia się i właściwości kompleksów polipeptydów	57
2. Udoskonalenie przewodnictwa drukowanych ścieżek poprzez optymalizację procesu syntezy oraz właściwości fizykochemicznych nanocząstek metali	58
3. Nanohybrydowe układy zawierające tlenek grafenu oraz nanocząstki jako funkcjonalne komponenty dla nowego typu biosensorów	59
Projekty badawcze NCN „Opus”	61
1. Nowe biomateriały zawierające polisacharydy jako efektywna platforma do adsorpcji i uwalniania czynników wzrostu fibroblastów: zastosowania w diagnostyce i w leczeniu chorób cywilizacyjnych	63
2. Nowe kompozyty smektytów z nanocząstkami TiO ₂ otrzymanymi metodą odwróconej mikroemulsji do zastosowań fotokatalitycznych	64
3. Gruboziarniste modelowanie węglowodanów	65
4. Funkcjonalne warstwy i nanostruktury otrzymywane przy pomocy epitaksji z wiązek molekularnych wspomaganej zewnętrznymi czynnikami	66
5. Teranostyczne nanonośniki nowej generacji dla detekcji, diagnostyki i neuroprotektynowego leczenia niedokrwienne uszkodzeń mózgu	67
6. Opracowanie podstaw szybkiej i taniej fizykochemicznej metody detekcji zanieczyszczeń wody, opartej na monitorowaniu dynamicznych właściwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz	68
7. Stany wzbudzone pod szkłem powiększającym -adaptacja metod opartych na analizie gęstości do badania molekularnych elektronowych stanów wzbudzonych	69
8. Struktura i Funkcja Korony Białkowej na Powierzchni Nanocząstek	70
9. Nowa generacja surfaktantów wieloładunkowych o dedykowanej funkcjonalności	71
10. Mechanizmy cyklizacji związków czynnych biologicznie katalizowane przez enzymy zależne od żelaza	72
11. Biodegradowalne, biokompatybilne i interaktywne surfaktanty - jako ekologicznie bezpieczna alternatywa dla syntetycznych związków w procesach wytwarzania pian i emulsji do zastosowań kosmetycznych, medycznych i przemysłowych	73
12. Od pojedynczych molekuł do granulek stresowych – zrozumienie mechanizmów separacji faz białek związanych ze stwardnieniem zanikowym bocznym	74

13. Badania nad kooperacją jonów metali w dwuatomowych centrach złożonych z jonów metali przejściowych	75
14. Strategie prewencji konserwatorskiej dla obiektów z poli(chlorku winylu)	76
Projekty badawcze NCN „Sonatina”	77
1. Multifunkcjonalne kompozytowe powłoki chitozanowe dla biodegradowalnych stopów Mg	79
Projekty badawcze NCN „Preludium Bis”	81
1. Wpływ funkcjonalizacji powierzchni nanocząstek metali i tlenków metali polifenolami niskocząsteczkowymi na ich aktywność w procesach fibrylizacji białek	83
Projekty badawcze NCN „Preludium”	85
1. Wolframowa oksydoreduktaza aldehydu z <i>Aromatoleum aromaticum</i> – badania mechanizmu reakcji katalitycznej	87
2. Analiza wpływu wybranych czynników na zmiany struktury α -synukleiny	88
3. Opracowanie racjonalnych wytycznych środowiskowych na potrzeby krótko-trwałych wydarzeń religijnych, kulturalnych i komercyjnych w budynkach zabytkowych	89
4. Synergistyczne układy spieniające oparte na modyfikowanych powierzchniowo nanocząstkach magnetycznych i biodegradowalnych surfaktantach aminokwasowych w kontrolowanej destabilizacji pian rzeczywistych w polu magnetycznym	90
Projekty badawcze NCN „Beethoven Life”	91
1. Struktura i funkcja enzymów glicynowo-rodnikowych katalizujących addycję do fumaranu: biochemia, modelowanie i zastosowanie	93
Projekty badawcze NCN „Solar-Driven Chemistry”	95
1. SolarMethaChem: Procesy wywołane światłem słonecznym dla fotochemicznej konwersji metanu	97
Projekty badawcze NCN „GRIEG”	99
1. Craquelure – Model obrazów ze spękaniem wspierający ustalenie racjonalnych wytycznych środowiskowych w muzeach	101
2. Teranostyczne nanoonośniki dla dostarczania leków w chorobach centralnego układu nerwowego	102
Projekty badawcze NCN „Miniatura”	103
1. Znaczenie utleniających i kwasowo-zasadowych właściwości centrów aktywnych dla ich aktywności - badania obliczeniowe dla enzymów zależnych od niehemowego żelaza	105
2. Synteza nowych koniugatów neuroleptyków będących pochodnymi fenotiazyny z nanocząstkami złota oraz ocena ich aktywności w procesach fibrylacji modelowych białek	106
3. Termoczułe emulsje wodno-wodne do zastosowań biomedycznych stabilizowane kopolimerami	107
4. Stabilność i własności fizykochemiczne pian wytwarzanych na bazie mieszanin związków powierzchniowo czynnych i polielektrolitów	108
5. Wpływ nanokryształizacji Mg na strukturę i odporność korozyjną fosforanowych warstw konwersyjnych do zastosowań biomedycznych	109
Projekty badawcze NCBR „EIG CONCERT-JAPAN”	111

1. Wielofunkcyjne, wysokosprawne materiały: porowate materiały kompozytowe do procesów membranowych	113
Projekty NCBR „TechMatStrateg”	115
1. Technologia biorafinacji olejów roślinnych do wytwarzania zaawansowanych materiałów kompozytowych	117
Projekty NCBR „Program operacyjny Inteligentny Rozwój”	119
1. CULDIGI - Projekt zintegrowanego systemu cyfryzacji, katalogowania i dokumentacji dziedzictwa kulturowego (obrazów oraz artefaktów 2D)	121
Projekty NCBR „TANGO”	123
1. Opracowanie funkcjonalnej formy aplikacji estrów cukrowych kwasów tłuszczowych na bazie bakteryjnych polihydroksyalkanianów hamujących rozwój komórek nowotworowych	125
Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej	127
1. PROM Międzynarodowa wymiana stypendialna doktorantów i kadry akademickiej	129
2. Struktura i Funkcja Korony Białkowej na Powierzchni Nanocząsteczek	130
Programy HORYZONT	131
1. IPERION-HS - Zintegrowane platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie	133
2. NanoPaInt - Dynamika gęstych nanosuspensji: droga do nowych funkcjonalnych materiałów	134
3. NewCat - Monooksygenazy polisacharydów katalizujące reakcje typowe dla cytochromów P450	135
4. GoGreen: green strategies to conserve the past and preserve the future of cultural heritage	136
Projekty akcji EU COST	137
1. Obliczeniowa chemia materiałowa dla wydajnego procesu rozkładu wody na nanokryształach zbudowanych z pierwiastków nieszlachetnych	139
Projekty strukturalne funduszy Unii Europejskiej	141
1. Środowiskowe Studia Doktoranckie „Interdyscyplinarność dla medycyny innowacyjnej” (InterDokMed)	143
2. Interdyscyplinarne Środowiskowe Studia Doktoranckie „Fizyczne, Chemiczne i Biofizyczne Podstawy Nowoczesnych Technologii i Inżynierii Materiałowej” (FCB)	144
Inne międzynarodowe projekty badawcze	145
1. Bioplastics upcyclig loop (BioPolyCycle)	147
Projekty programu Erasmus+	149
PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM	155
OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ	185
UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH	187
WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH	206
SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU	207
UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE	209

SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2023:

realizowano:	17 statutowych zadań badawczych 40 projektów badawczych (grantów) NCBR, NCN 2 projekty NAWA 1 projekt UE COST Action 4 projekty UE Horyzont 2 projekty Funduszy Strukturalnych UE 2 inne projekty międzynarodowe
opublikowano:	1 monografie i 7 rozdziałów (w tym 1 spoza listy) 116 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy JCR 4 publikacji w innych czasopismach, 173 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych
wydano nakładem Instytutu:	1 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN
wyłożono i zaprezentowano:	155 referatów (w tym 22 referaty plenarne i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 102 postery
otrzymano:	2 patenty (8 zgłoszeń patentowych)
we współpracy z zagranicą:	opublikowano 62 wspólnych prac w czasopismach naukowych ogłoszono 27 komunikatów w materiałach konferencyjnych zrealizowano 24 wyjazdów pracowników i doktorantów Instytutu za granicę (Erasmus+ oraz NAWA PROM)
zorganizowano:	1 konferencje krajową 1 konferencję międzynarodową współorganizowali pracownicy z IKiFP PAN
uzyskano:	Stopień doktora habilitowanego – 1 osoba Stopień doktora - 11 osób

WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2023

- wyniki uzyskane w ramach projektów/ zadań badawczych

Udoskonalenie przewodnictwa drukowanych ścieżek poprzez optymalizację procesu syntezy oraz właściwości fizykochemicznych nanocząstek metali, "SONATA" NCN 2020/39/D/ST5/01937, Anna Pajor-Świerzy

Badania wpisywały się w trend rosnącego zainteresowania produkcją ścieżek przewodzących do tzw. „elastycznej” drukowanej elektroniki z zastosowaniem tuszów na bazie nanocząstek (NPs) metali. Opracowano nową efektywną metodologię wytwarzania drukowanych powłok na bazie Ni-Ag NPs poprzez zastosowanie procesu spiekania w niskiej temperaturze, w celu uniknięcia destrukcji wrażliwych temperaturowo podłoży, przy jednoczesnym wykorzystaniu tuszy o niskiej cenie.

Nowe biomateriały zawierające polisacharydy jako efektywna platforma do adsorpcji i uwalniania czynników wzrostu fibroblastów: zastosowania w diagnostyce i w leczeniu chorób cywilizacyjnych, "OPUS" NCN 2018/31/B/ST8/03277, dr hab. Aneta Michna

Celem badań było opracowanie efektywnej metody tworzenia stabilnych filmów polielektrolitowych umożliwiających kontrolowane przyłączenie i uwalnianie czynników wzrostu fibroblastów, jako narzędzia w leczeniu chorób cywilizacyjnych. Przeprowadzono pełną charakterystykę fizykochemiczną czynnika wzrostu fibroblastów 21 (CWF21), dostarczając do tej pory nieopublikowanych, kompleksowych danych eksperymentalnych dotyczących ich właściwości. Ponadto wykazano, że CWF21 zaadsorbowany nieodwracalnie na dwuwarstwie polielektrolitowej osadzonej na podłożu stałym nie jest toksyczny dla badanych linii komórkowych.

- najważniejsze w roku sprawozdawczym osiągnięcie działalności naukowej jednostki o znaczeniu ogólnospołecznym lub gospodarczym

Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki środowiska w ich otoczeniu, prof. Łukasz Bratasz

Opracowano kompleksowy i efektywny model osiadania cząstek pyłu na powierzchniach wewnętrznych w zabytkowych budynkach, biorąc pod uwagę różnorodne mechanizmy osadzania i właściwości powierzchni. Wykazano, że istniejące przekonanie o możliwości znacznego ograniczenia depozycji cząstek pyłu poprzez ogrzanie powierzchni nie jest prawdziwe dla typowych powierzchni architektonicznych. Model pogłębia wiedzę na temat jednego z kluczowych zagrożeń środowiskowych dla wnętrz zabytkowych i cennego wyposażenia wnętrz, dostarczając istotnych wskazówek dla konserwatorów i zarządców obiektów zainteresowanych oceną i łagodzeniem zagrożeń dla różnych typów wnętrz zabytkowych.

- zastosowanie wyników badań naukowych lub prac rozwojowych o znaczeniu społecznym i gospodarczym; działania zwiększające innowacyjność

Opracowanie innowacyjnej metody przekształcania komercyjnych bioplastików w cenne surowce bogate w węgiel, dr hab. Maciej Guzik

Opracowano nowoczesną metodę przekształcania komercyjnych bioplastików, takich jak polilaktyd (PLA), polikaprolakton (PCL) i polihydroksyalkanoaty (PHA), w cenne surowce bogate w węgiel, które mogą być następnie wykorzystane do biotechnologicznej produkcji biopolimerów, takich jak PHA i celuloza bakteryjna (BC). Opracowane podejście jest strategicznie zgodne z dziewięcioma Celami Zrównoważonego Rozwoju Organizacji Narodów Zjednoczonych, przyczyniając się do poprawy zdrowia, efektywnego zarządzania odpadami, czystej wody, sanitariatów i zrównoważonych praktyk przemysłowych.

Opracowanie efektywnego materiału elektrolitowego do ogniw paliwowych o obniżonej temperaturze pracy, dr hab. Michał Mosiałek

Badania nad nowymi materiałami do ogniw paliwowych z elektrolitem ze stałego tlenu pozwoliły na opracowanie efektywnego materiału o obniżonej temperaturze spiekania, co uzyskano poprzez domieszkowanie istniejącego elektrolitu atomami niklu, optymalizując ten proces w oparciu o analizę materiału dostępnymi metodami fizykochemicznymi. Urządzenie z ogniwami paliwowymi w opracowanej konfiguracji wykazało długotrwałą stabilność pracy przez okres 100 godz. W temperaturze 700°C pod obciążeniem 120 mA/cm².

INNE WAŻNE OSIĄGNIĘCIA W ROKU 2023:

W roku 2023 IKiFP PAN zorganizował 1 konferencję na terenie swojej placówki, a w jednej konferencji pracownicy Instytutu brali czynny udział jako współorganizatorzy.

Organizacja konferencji i posiedzeń naukowych

- LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (LV Polish Annual Conference on Catalysis), 22-24 marca 2023, Kraków (P. Warszński, D. Rutkowska-Żbik)
- 15th European Congress of Catalysis) EuropaCat-15 „A Pilar for Modern Chemistry”, 27.08-01.09.2023, Praga

W dniach 27.08-01.09.2023 w Pradze odbyła się międzynarodowa konferencja (15th European Congress of Catalysis) EuropaCat-15 „A Pilar for Modern Chemistry”. Polski Klub Katalizy (dr hab. R. Tokarz-Sobieraj, prof. IKiFP PAN, dr hab. D. Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN), Czech Catalysis Group of the Czech Chemical Societies, Slovak Catalysis Society, Hungarian Catalysis Society byli wyłonieni przez EFCATS (European Federation of Catalysis Societies) do prac w ramach komitetu organizacyjnego. Podczas konferencji naukowcy i badacze ze środowisk akademickich i przemysłowych z całego świata dyskutowali na temat ważnych wyzwań w dziedzinie katalizy oraz powiązanych obszarów przemysłowych i nie tylko. Udział w konferencji wzięło 1803 uczestników z 53 krajów z czego: 795 (z ośrodków akademickich), 187 (z przemysłu), 699 studentów, 90 wystawców. Wygłoszono 466 wykładów (7 plenarnych, 25 key-note, 200 orali, 203 krótkich-orali) i zaprezentowano 1087 posterów. Congress Chair była Prof. dr hab. Małgorzata Witko z IKiFP PAN.

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU

Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju

1. Badania doświadczalne i obliczeniowe nad wybranymi enzymami o potencjalnym aplikacyjnym

(prof. dr hab. Tomasz Borowski, prof. dr hab. Maciej Szaleniec, dr Anna Kluza, dr Anna Miłaczewska-Kręgiel, dr inż. Mateusz Tataruch, dr Zuzanna Wojdyła, dr Agnieszka Wojtkiewicz, mgr Justyna Andrys)

Opracowano chromatograficzną metodę identyfikacji substratu (dihydroksyfenylalaniny, DOPA) i produktu (kwasu betalaminowego) reakcji katalizowanej przez enzym dioksygenaza ekstradiolowa L-DOPY z *Beta vulgaris* (DODA, ang. *L-DOPA 4,5-dioxygenase*) z wykorzystaniem kolumny Ascentic RP-Amide Express. Opracowano test reaktorowy do oznaczenia aktywności enzymu homogenicznego na podstawie którego wykryto aktywność nieimmobilizowanego enzymu. Wykonano immobilizację kowalencyjną enzymu BvDODA na trzech nośnikach krzemionkowych typu SBA-15 posiadających grupy hydroksylowe (linker: 3% diwinylosulfon), aminowe (linker: 3% aldehyd glutarowy) i glicydylowe. Po trzygodzinnej immobilizacji analiza ilościowa białka wykazała 100% wiązanie białka z nośnikami. W 16 godzinny teście reaktorowym immobilizowany enzym nie wykazał aktywności katalitycznej.

Dla enzymu tH6H wykonano wstępne badania szybkiej kinetyki reakcji metodą stopped-flow z monitorowaniem postępu reakcji przy pomocy widm UV-Vis. Niestety, okazało się, że współczynnik ekstynkcji dla ferrylowego produktu pośredniego ma zbyt niską wartość by przy osiągalnych stężeniach udało się na dostępnym sprzęcie zaobserwować jego powstawanie i zanik. Dla kompleksów tH6H-Fe(II)- α KG-HYO i tH6H-Fe(II)- α KG-6OH-HYO otrzymanych w warunkach beztlenowych oraz dla szybko (odpowiednio 100 i 500 ms) zamrożonych mieszanin reakcyjnych, powstałych ze zmieszania roztworów tych kompleksów z natlenowanym buforem, zmierzono widma Mossbauera. Dekonwolucja uzyskanych widm potwierdziła obecność ferrylowego produktu pośredniego oraz dostarczyła pierwszych parametrów spektroskopowych dla tH6H-Fe(IV)O-SUC-6OH-HYO. Badania stopped-flow oraz rapid freeze quench wykonano dzięki współpracy z grupą prof. A. Osyczki (WBBiB UJ), a pomiary Mossbauera wykonał prof. J. Korecki.

Dla enzymu tCODM uzyskano strukturę krystaliczną dla kompleksu białka z Ni(II), NOG oraz protopina, która jest pierwszą dostępną strukturą dającą cenny wgląd w wiązanie substratu przez roślinne O-demetylazy. Struktura ta była punktem wyjścia dla badań obliczeniowych, które obejmowały: symulacje dynamiki molekularnej dla kompleksów tCODM-Fe(II)- α KG-protopina oraz tCODM-Fe(IV)O-SUC-protopina i obliczenia QM/MM dla przebiegu reakcji hydroksylacji protopiny. Obliczone profile energii swobodnej sugerują, że reakcja aktywacji wiązania C-H przebiega w tzw kanale π , co prowadzi do utworzenia produktu pośredniego w stanie wzbudzonym. Kolejnymi etapami reakcji są deekscytacja do stanu podstawowego i rekombinacja rodnika węglowego z grupą OH.

Dla enzymu UGT270 przeprowadzono serię symulacji dynamiki molekularnej dla kilku wariantów enzymu: formy apo, kompleksu z UDP-glukozą oraz podwójnych kompleksów z UDP-glukozą i: kamferolem, naringeniną lub kwercetyną. Analiza uzyskanych trajektorii pozwoliła na: a) zaproponowanie orientacji cząsteczek substratu w strukturach krystalicznych, b) wyznaczenie mobilności pętli, które domykają miejsce aktywne enzymu, w zależności od obsadzenia ligandami, c) wyznaczenie energii wiązania ligandów dla kilku możliwych orientacji w miejscu wiążącym.

2. Biopolimery bakteryjne jako źródło hydroksykwasów do zastosowania jako komponenty typu HBD do wytwarzania cieczy głęboko eutektycznych (DES).

(dr hab. Maciej Guzik, prof. IkiFP PAN, dr inż. Ewelina Cichoń, mgr Anna Faruga, dr inż. Robert Karcz, dr Joanna Kryściak-Czerwenka, dr inż. Justyna Prajsnar, dr Wojciech Snoch)

Ciecze głęboko eutektyczne (DES) to jedna z podklas cieczy jonowych. Mieszaniny te zostały po raz pierwszy opisane w literaturze, pod tą nazwą, na początku XXI wieku. Powstają one wskutek oddziaływania pomiędzy przynajmniej dwoma związkami chemicznymi – jeden z nich jest donorem wiązania wodorowego (HBD), a drugi jego akceptorem (HBA). Oddziaływanie poprzez wiązanie wodorowe pomiędzy tymi substancjami w istotny sposób zmienia właściwości fizykochemiczne uzyskanej mieszaniny, w stosunku do właściwości jej czystych składników. Wśród związków zdolnych do tworzenia tego typu cieczy jonowych szczególnie istotne są związki pochodzenia naturalnego, często otrzymywane z odnawialnych źródeł węgla. Ciecze eutektyczne otrzymane w oparciu o związki naturalne zyskały własną nazwę zwyczajową – NADES. Mieszaniny tego typu można uzyskać z wykorzystaniem kwasów organicznych, aminokwasów, amin oraz szeregu innych związków. W badaniach realizowanych w sprawozdawanym okresie określono przydatność biopolimerów otrzymywanych w procesie fermentacji bakteryjnej jako źródła komponentów do przygotowania cieczy typu NADES. Biopolimery są materiałami biokompatybilnymi i biodegradowalnymi. Zastosowanie ich jako źródła 3-hydroksykwasów umożliwiłoby też zagospodarowanie ewentualnych odpadów lub zużytych produktów wykonanych z biopolimerów, i wykorzystanie ich jako surowca do otrzymania nowych, przydatnych produktów.

Celem prezentowanych badań było określenie przydatności biopolimerów bakteryjnych jako źródła chiralnych 3-hydroksykwasów organicznych do zastosowania jako donory wiązania wodorowego (HBD) w mieszaninach eutektycznych. Do badań zostały wybrane trzy biopolimery bakteryjne otrzymane w naszym laboratorium:

- 1) polihydroksymaślan (PHB) – otrzymany z glicerolu przez bakterie *Zobellella denitrificans*,
- 2) polihydroksyoktanian (PHO) – otrzymany z kwasu oktanowego z wykorzystaniem *Pseudomonas putida* KT2440,
- 3) polihydroksynonanian (PHN) – otrzymany z kwasu nonanowego wytworzonego przez *Pseudomonas putida* KT2440.

Dla każdego z polimerów przeprowadzono szereg procesów prowadzących do uzyskania mieszaniny naturalnych 3-hydroksykwasów i oznaczono wydajność uzyskiwanej mieszaniny w stosunku do masy biopolimeru. Dodatkowo wykonano badania jakościowe uzyskanych mieszanin metodami GC i HPLC, oraz przy pomocy spektroskopii mas. W przypadku mieszanin otrzymanych w wyniku przekształcenia polimerów PHO i PHN końcowa wydajność produktu po zakończeniu cyklu oczyszczania, suszenia i ekstrakcji wynosiła około 86%. Dla mieszanin monomerów otrzymanych z polimeru PHB uzyskano wydajność mieszaniny kwasów rzędu 30%. W dalszych badaniach skupiono się na doborze, optymalizacji i zbadaniu przebiegu procesu otrzymywania mieszaniny 3-hydroksykwasów z PHB. Na każdym z etapów procesu uzyskiwane mieszaniny próbkowano i poddawano analizie z metodami chromatograficznymi. W zależności od metodyki przeprowadzenia kolejnych etapów procesu wyznaczona wydajność produktu wynosiła od 30 do 65%. Optymalizacja tego procesu będzie kontynuowana tak aby zwiększyć wydajność monomerów kwasu *R*-3-hydroksy-butyloвого. Uzyskane mieszaniny 3-hydroksykwasów oraz komercyjny chlorek choliny zastosowano do otrzymania NADES poprzez zmieszanie tych składników w różnych stosunkach HBD:HBA i poddano wstępnej charakterystyce.

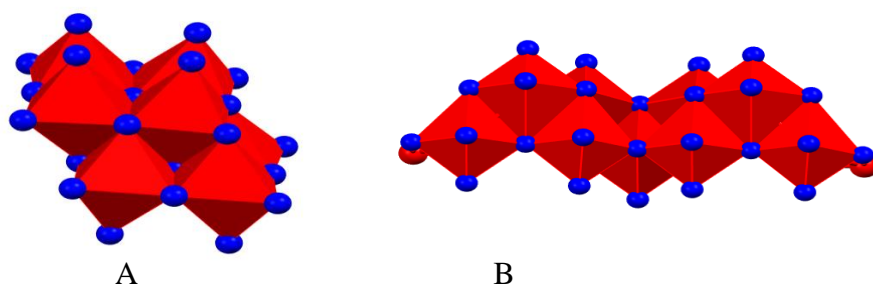
3. Nowe perokso- oraz poliokso- związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania

(prof. dr hab. Wiesław Łasocha, dr hab. Katarzyna Pamin, mgr Daria Napruszewska)

Celem naszych badań była synteza, badania strukturalne i fizykochemiczne oraz określenie aktywności katalitycznej nowych polioksomolibdenianów w reakcji utleniania węglowodorów. Polioksomolibdeniany są rodzajem związków nieorganicznych typu POM, które w swojej trójwymiarowej strukturze łączą jony tlenu z molibdenem jako metalem przejściowym w jego najwyższym stopniu utleniania. Skład cząsteczki polioksomolibdenianu może być w określony sposób modyfikowany poprzez wprowadzenie takich pierwiastków, które pozwolą na uzyskanie pożądaných właściwości. Dzięki tej strukturalnej różnorodności polioksomolibdeniany znajdują szerokie zastosowanie w takich dziedzinach jak medycyna, materiałoznawstwo czy kataliza.

Obecne badania miały na celu przygotowanie preparatów mono-, di-, trójmolibdenianów oraz molibdenianów o strukturze Andersona modyfikowanych metalami przejściowymi takimi jak Ni, Zn, Co, Cu. Otrzymane zostały także polioksomolibdeniany metylobenzylaminy. Otrzymane materiały zostały scharakteryzowane za pomocą analizy termicznej TG/DSC oraz dyfraktometrii rentgenowskiej XRPD w celu określenia składów fazowych.

Otrzymane katalizatory zostały zastosowane w reakcji selektywnego utleniania cyklooktanu tlenem molekularnym w stalowym reaktorze w fazie ciekłej, w temperaturze 120°C, pod ciśnieniem 10 atm powietrza przez 6 godzin. Wszystkie otrzymane katalizatory były aktywne w badanej reakcji. W reakcji utleniania obok cyklooktanonu i cyklooktanolu powstaje także kwas suberynowy. Najwyższą aktywność zaobserwowano dla trójmolibdenianów cynku i kobaltu, natomiast trójmolibdenian Cu wykazuje najniższą aktywność katalityczną. Zarówno mono- jak i oktamolibdenian metylobenzylaminy wykazują dobrą aktywność katalityczną w badanej reakcji, przy czym MBA-MONO wykazuje znacznie wyższą wydajność do ketonu (42.9%) w porównaniu do MBA-OCTA (36.9%).



Rys. 1 Anion oktamolibdenianowy (A) i trójmolibdenianowy (B) występujące w badanych związkach polioksomolibdenianowych.

4. Badania efektów strukturalnych i wpływu charakteru nośnika na aktywność bimetalicznych katalizatorów miedziowo-niklowych

(dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. dr hab. Małgorzata Witko, dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj, dr hab. Anna Micek-Ilnicka, dr Michał Śliwa, dr inż. Katarzyna Samson, dr Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk, dr Łukasz Kuterasiński, dr Mariusz Gackowski, dr Robert Kosydar, dr Erwin Lalik, dr Małgorzata Zimowska, mgr Jerzy Podobiński, mgr Natalia Ogródowicz, mgr Joanna Kaim)

Celem tegorocznego zadania było zbadanie jak rodzaj zastosowanego nośnika tlenkowego wpływa na właściwości i aktywność katalityczną katalizatorów miedziowo-niklowych w niskotemperaturowej reakcji uwodornienia aldehydu furfurylowego w fazie gazowej.

Jako nośniki fazy aktywnej użyto następujących tlenków: SiO_2 (amorficzna krzemionka, SSA = 213 m^2/g), CeO_2 (SSA = 2,60 m^2/g) i ZrO_2 (SSA = 0,87 m^2/g). Fazę metaliczną miedziowo-niklową наносono stosując metodę mokrej impregnacji z roztworu azotanu miedzi(II) i azotanu niklu(II), próbki suszono w temperaturze 120°C przez 10 h, po czym kalcynowano w 500°C przez 3 h w przepływie powietrza w celu uzyskania tlenkowych form metali w katalizatorach. Uzyskane preparaty, w których zawartość miedzi do niklu wynosiła 1:1 i stanowiła 2% i 5% wagowych, scharakteryzowano przy użyciu szeregu technik fizyko-chemicznych: XRD, H_2 -TPR, fizysoadsorpcja N_2 , XRF i SEM/EDS. Reakcję katalityczną prowadzono w reaktorze przepływowym ze złożem stałym. Produkty i substraty analizowano za pomocą chromatografu gazowego wyposażonego w detektor FID. Do typowego pomiaru 150 mg katalizatora mieszano z kwarcem i umieszczano w reaktorze. Następnie próbkę redukowano (w temperaturze wyznaczonej w pomiarze H_2 -TPR) w przepływie gazu zawierającego 20% H_2 w Ar i obniżano temperaturę do 120°C. Do wytworzenia par furfuralu zastosowano termostatowaną płuczkę o temperaturze 54,5°C. Stosunek objętościowy FAL do wodoru w strumieniu reakcyjnym wynosił 1:10. Reakcję katalityczną prowadzono w temperaturach 120°C, 160°C i 200°C.

Analiza XRD wykazała obecność faz CuO i NiO jedynie w przypadku katalizatorów osadzonych na SiO_2 . W obrazach dyfrakcyjnych katalizatorów osadzonych na CeO_2 i ZrO_2 nie występują refleksy XRD przypisane fazom aktywnym. Może to wynikać z bardzo małych krystalitów CuO i NiO, które tworzą się na powierzchni ZrO_2 i CeO_2 , poniżej granic wykrywalności XRD. Niemniej jednak obecność miedzi i niklu na tych nośnikach została potwierdzona analizą XRF, która wykazała, że wyznaczone wartości zawartości obu faz aktywnych są zgodne z wartościami założonymi. W profilach H_2 -TPR katalizatorów bimetalicznych występują nakładające się sygnały od redukcji CuO i NiO. Ich położenie zależy od zastosowanych nośników i dla wszystkich katalizatorów jest niższe od temperatury redukcji wzorcowych CuO i NiO. W przypadku wszystkich katalizatorów konwersja aldehydu furfurylowego wzrasta wraz z temperaturą reakcji, osiągając 73% dla $\text{Cu}_{1,0}\text{Ni}_{1,0}/\text{CeO}_2$ w temperaturze 160°C. Selektywność do alkoholu furfurylowego jest najwyższa, gdy reakcję prowadzi się w temperaturze 120°C (33% dla $\text{Cu}_{2,5}\text{Ni}_{2,5}/\text{SiO}_2$). Wzrost temperatury powoduje, że wśród wykrywanych produktów spada selektywność w stosunku do alkoholu furfurylowego, a zaczyna dominować furan. Dowodzi to, że szlak dekarbonylacji jest preferowany w stosunku do uwodornienia furfuralu. Dodatkowo wśród produktów wykryto także 2-metylofuran i propan, co sugeruje, że w badanym układzie zachodzą również reakcje hydrogenolizy i otwarcia pierścienia.

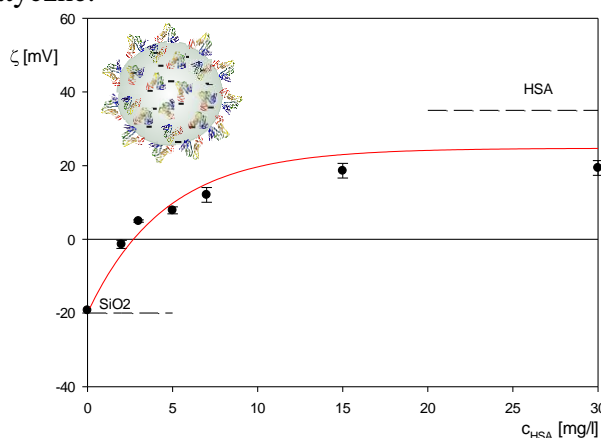
Podsumowując, stwierdzono, że rodzaj zastosowanego nośnika fazy metalicznej wpływa silnie na aktywność i selektywność omawianych katalizatorów w dystrybucji produktów uwodornienia furfuralu. Najaktywniejsze katalizatory to te, w których faza aktywna osadzona jest na CeO_2 , najmniejszą aktywnością charakteryzują się te, w których faza aktywna osadzona jest na ZrO_2 .

Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej

5. Mechanizmy i kinetyka immobilizacji białek na powierzchniach ciała stałe/elektrolit: Określenie mechanizmu tworzenia koron cząsteczek albuminy ludzkiej na powierzchni nośników polimerowych oraz krzemionkowych” - kontynuacja

(dr hab. Małgorzata Nattich-Rak, dr Marta Sadowska, dr Monika Wasilewska, mgr Katarzyna Kusak, prof. Zbigniew Adamczyk)

Procesy osadzaniem wirusów do powierzchni abiotycznych mają istotne znaczenie dla ich efektywnej dezaktywacji i usuwaniem na drodze filtracji, co może znacząco ograniczać rozprzestrzeniania się epidemii. Jednakże, pomimo istotnego znaczeni, brak jest w literaturze prac eksperymentalnych dotyczących ilościowej analizy fizykochemicznej tych procesów. Sformułowano tezę, że istotne informacje o mechanizmach oddziaływań wirusów z powierzchniami abiotycznymi można uzyskać prowadząc pomiary dla układów modelowych opartych na nośnikach koloidalnych z koronami białkowymi. W związku z tym przeprowadzone badania dotyczyły układu nanocząstek ditlenku krzemu zastosowanego jako nośnik dla cząsteczek albuminy ludzkiej (HSA). W pierwszym etapie badań określono ich podstawowe właściwości fizykochemiczne takie jak wsp. dyfuzji, średnica hydrodynamiczna, ruchliwość elektroforetyczna, potencjał zeta oraz stabilność suspensji w zależności od siły jonowej i pH. Przeprowadzono również pomiary referencyjne kinetyki adsorpcji albuminy na powierzchniach sensorów z ditlenku krzemu modyfikowanych przez adsorpcję makrokationu (PARG) przy zastosowaniu metody reflektometrii optycznej i mikroskopii sił atomowych (AFM). Wyniki te wykorzystano jako dane referencyjne do analizy mechanizmu adsorpcji albuminy na cząstkach ditlenku krzemu o rozmiarach 140 nm, co prowadziło do powstawania koron białkowych (Rys. 1). Określono ilościowo wpływ siły jonowej na pokrycie maksymalne albuminy na powierzchni nanocząstek ditlenku krzemu oraz na stabilność tworzonych układów. Wykazano, że dominującą rolę w procesach tworzenia koron białkowych odgrywiają oddziaływania elektrostatyczne.



Rys. 1. Zależność potencjału zeta cząstek ditlenku krzemu od stężenia HSA w roztworze: pH 4,0, 10 mM NaCl, stężenie cząstek ditlenku krzemu 500 mgL^{-1} , (●) wyniki eksperymentalne uzyskane z pomiarów LDV. Linia ciągła przedstawia wyniki teoretyczne uzyskane z ogólnego modelu elektrokinetycznego, linia przerywana oznacza potencjał zeta cząsteczek albuminy w roztworze.

Wyniki przeprowadzonych badań wykazały, że możliwe jest przygotowanie stabilnych cząstek koloidalnych z koroną białkową (pseudowirusów) charakteryzujących się dobrze zdefiniowanymi właściwościami fizykochemicznymi. Cząstki takie mogą być wykorzystywane jako układy modelowe do przewidywania kinetyki osadzania wirusów na powierzchniach abiotycznych, a tym samym do opracowania efektywnych metod ich usuwania i dezaktywacji w procesach filtracji.

6. Fluorescencyjne monowarstwy nanoklastrów metali o kontrolowanej strukturze oraz właściwościach elektrokinetycznych otrzymywane na powierzchniach nośników koloidalnych

(dr hab. Magdalena Oćwieja, prof. IKiFP PAN, dr hab. Małgorzata Nattich-Rak, dr hab. Aleksandra Pacuła, dr Dorota Duraczyńska, dr Marta Sadowska, dr Monika Wasilewska, dr Paulina Żeliszewska, dr Julia Maciejewska-Prończuk, mgr Patrycja Gnacek, mgr Oliwia Kowalska, inż. Katarzyna Kusak, dr Alicja Michalik)

Fluorescencyjne nanoklastry metali otrzymane na matrycy białek wykazują duże przesunięcia Stokesa, doskonałą fotoluminescencją, fotostabilnością oraz niską toksycznością w porównaniu z kropkami kwantowymi. Dlatego też są one szeroko stosowane w diagnostyce genetycznej i nowotworowej, kierunkowym dostarczaniu leków, katalizie oraz analityce chemicznej. Znane są metody syntezy fluorescencyjnych nanoklastrów m.in. srebra, złota i miedzi przy zastosowaniu albumin (HSA, BSA), γ -globulin (IgG, IgM, IgA) oraz transferryny i lizozymu. Niewiele wiadomo jednak o zmianach konformacyjnych oraz właściwościach elektrokinetycznych białek spowodowanych zasadowym środowiskiem reakcji i inkorporacją metali w ich strukturę. Ponadto, w literaturze nie opisano procesów samoorganizacji nanoklastrów na powierzchniach granicznych ciało stałe/ciecz. Dlatego też głównym celem badań stało się określenie i opisanie procesów osadzania fluorescencyjnych nanoklastrów metali na powierzchniach nośników koloidalnych, m.in. cząstek krzemionki oraz polistyrenowych.

Trzy typy nanoklastrów złota (AuNCs) zostały otrzymane metodą redukcji chemicznej prowadzonej przy użyciu albuminy ludzkiej (HSA) i wołowej (BSA) oraz lizozymu białka jaja kurzego (HEWL) w alkalicznym środowisku. Za pomocą wysokorozdzielczej transmisyjnej mikroskopii elektronowej (HR-TEM) wyznaczono, że niezależnie od typu zastosowanego białka wielkość metalicznego rdzenia wynosiła $1,5 \pm 0,5$ nm. Średnica hydrodynamiczna nanoklastrów wahała się zaś od $5,1 \pm 0,2$ nm do $6,3 \pm 0,3$ nm odpowiednio dla HEWL-AuNCs oraz HSA-AuNCs. Nanoklastry wykazywały silną luminescencję przy długości fali 650 nm, której intensywność silnie malała w środowisku kwasowym ($\text{pH} < 3,5$). Badania przeprowadzone za pomocą techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS) wykazały, że silna agregacja każdego typu nanoklastrów, objawiająca się wzrostem średnicy hydrodynamicznej, występuje w zakresie $4,3 < \text{pH} < 7,8$. Poza wskazanym zakresem nanoklastry wykazywały stabilność dla sił jonowych nie przekraczających wartości 0,15 M. Ponadto, wykazano silny wpływ siły jonowej oraz pH na właściwości elektrokinetyczne nanoklastrów. Wyznaczono punkty izoelektryczne nanoklastrów, które wahały się w zakresie 5,6-5,8 i dla HSA-AuNCs i BSA-AuNCs dość dobrze korelowały z wartościami punktów izoelektrycznych albumin. Dla danego pH, wraz ze wzrostem siły jonowej obserwowano obniżenie wartości potencjału zeta. Dla przykładu, dla pH 4,0 potencjał zeta HSA-AuNCs wynosił 80 ± 2 mV oraz 15 ± 3 mV dla siły jonowej 10^{-4} oraz 0,15 M. Posiadając dobrze scharakteryzowane AuNCs przystąpiono do badania sterowanej oddziaływaniami elektrostatycznymi ich samoorganizacji na powierzchniach sulfonowych i amidynowych mikrosferach polistyrenowych o średniej wielkości odpowiednio 800 ± 15 nm oraz 820 ± 23 nm. Wyznaczono zależności ruchliwości elektroforetycznej oraz potencjału zeta mikrosfer od stężenia nanoklastrów w suspensjach o kontrolowanym pH oraz sile jonowej. Badania przeprowadzone dla pH 4,0 wykazały, że potencjał zeta mikrosfer rośnie wraz ze wzrostem stężenia HSA-AuNCs od -60 ± 3 mV do 40 ± 3 mV, co wskazywało na formowanie monowarstw nanoklastrów na powierzchniach cząstek koloidalnych. Utworzone warstwy nanoklastrów były stabilne w pH 4,0 oraz siłach jonowych nie wyższych niż 10^{-2} M. Ponadto, za pomocą obrazowania z użyciem mikroskopii konfokalnej oraz pomiarów spektrofluorymetrycznych wykazano, że osadzone monowarstwy nanoklastrów zachowały właściwości fluorescencyjne. Tym samym potwierdzono otrzymanie fluorescencyjnych cząstek koloidalnych o rozmiarach znacznie większych niż rozmiary niezwiązanych nanoklastrów.

7. Właściwości fizykochemiczne i mechaniczne układów „bio”

(dr hab. Aneta Michna, dr inż. Maria Morga, dr Agata Pomorska, dr hab. Piotr Batys, dr Leszek Krzemień, dr hab. inż. Jakub Barbasz, prof. IKiFP PAN)

Celem zadania było zbadanie układów określanych jako „bio” w zakresie ich właściwości fizykochemicznych (takich jak ładunek, kształt i rozkład rozmiarów cząsteczek i cząstek w funkcji parametrów środowiska, struktura wewnętrzna wybranych cząsteczek) oraz mechanicznych (takich jak moduły Younga, struktura przestrzenna upakowania).

Zadanie statutowe uzupełniało i rozwijało badania prowadzone w ramach zadania statutowego z roku 2022 realizowanego przez członków grupy „Układy w nano i mikroskali”.

Kontynuując badania statutowe z roku 2022 pracowaliśmy nadal nad modelowaniem komputerowym indentacji wykonywanej z użyciem mikroskopu sił atomowych. Nadal skupialiśmy swoje wysiłki na modelowaniu eksperymentów z wykorzystaniem sondy typu „colloidal probe”. Metodą prowadzenia badań symulacyjnych była metoda elementów skończonych. W roku tym rozwinęliśmy opracowany model komórki w oparciu o wypełnienie jej wnętrza przez płyn lepko sprężysty, będący lepszym przybliżeniem niż powszechnie stosowane modele nie uwzględniające dyssypacji energii w wyniku sił tarcia co ważne wykonywaliśmy porównania modelowania przy założeniu stałego ciśnienia wewnętrznego z modelem o stałej objętości. Zastosowaliśmy również warstwę tzw. korteksu jako elementu ograniczającego komórkę z zewnątrz.

Zaproponowany model jest stosunkowo łatwy w użyciu (porównywalnie do funkcji Hertza) w celu wyodrębnienia właściwości komórki z pomiaru, z dodatkowym uwzględnieniem struktury wewnętrznej komórki.

Pracowaliśmy również nad zachowaniem makro jonów w zależności od parametrów środowiska w jakim się one znajdują.

Pracowaliśmy również nad metodami analizy danych z mikroskopii sił atomowych w szczególności nad analizą struktury fibryli tworzonych z różnych białek powiązanych z chorobami neurodegeneracyjnymi (tau oraz amyloid beta) ^{1,2}

Prowadziliśmy również prace nad białkami i ich strukturą w kontekście wykorzystania w przemyśle spożywczym².

[1] Nanoscale insights into the local structural rearrangements of amyloid- β induced by bexarotene, Kamila Sofińska, Piotr Batys, Adrian Cernescu, Dhiman Ghosh, Katarzyna Skirlińska-Nosek, Jakub Barbasz, Sara Seweryn, Natalia Wilkosz, Roland Riek, Marek Szymoński, Ewelina Lipiec, *Nanoscale* 15 (35), 14606-14614

[2] The influence of thermodynamic qualities of a solvent on the physicochemical properties of lentil protein concentrate—Second virial coefficient study, Daniel Żmudziński, Urszula Goik, Paweł Ptaszek, Anna Ptaszek, Jakub Barbasz, Joanna Banaś, Dawid Lupa, *Food Chemistry* 434, 137329

8. Właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultra wysokiej próżni

(prof. dr hab. Nika Spiridis, prof. dr hab. Józef Korecki, dr hab. Jacek Gurgul, dr inż. Kinga Freindl, dr inż. Ewa Madej, dr inż. Ewa Młyńczak, dr Robert Socha, dr inż. Dorota Wilgocka-Słężak, mgr Bohdana Blyzniuk, mgr Natalia Kwiatek)

Kontynuowano prowadzone we współpracy z AGH badania układów spintronicznych opartych na antyferromagnetycznych tlenkach metali 3d. Właściwości cienkich warstw NiO(001) w epitaksjalnych heterostrukturach NiO/MgO(d)/Cr oraz Fe/NiO/MgO(d)/Cr na podłożu MgO(001), badane były w funkcji grubości d warstwy MgO. Pomiary magnetycznego liniowego dichroizmu promieniowania X pokazały, że ze wzrostem grubości d spiny NiO doznają rotacji z kierunku w płaszczyźnie warstwy do kierunku prostopadłego. Odpowiedzialną za ten proces modyfikację magnetycznej anizotropii antyferromagnetycznej warstwy NiO wyjaśniono zmianą naprężeń na granicy NiO/MgO. Pokazano również, że do modyfikacji anizotropii magnetycznej antyferromagnetyka można też wykorzystać oddziaływania wymienne NiO z ferromagnetyczną warstwą Fe.

Inna współpraca z AGH dotyczyła określenia wpływu białek zewnętrznych (czynniki endogenne) oraz nanocząstek tlenku wolframu (czynnik egzogeny) na aktywność fotosystemu II (PSII), a w szczególności na proces wydzielania tlenu. W tym celu wytworzono nowego typu samoorganizujący się układ hybrydowy w formie koloidalnej, wykorzystując półprzewodnikowe (typu n) nanocząstki (NPs) tlenku wolframu (WO_3) i izolowane ze szpinaku membrany, tzw. PSII BBY. Taki układ hybrydowy powinien wykazywać zdolność do wydzielania tlenu zbliżoną do wydajności naturalnego układu PSII, a jednocześnie nie wymaga dodatkowych nośników ładunku i jest zdolny do pracy w neutralnych warunkach wodnych. Zbadano fotosyntetyczną aktywność układu PSII BBY – WO_3 NPs wykorzystując spektroskopię absorpcyjną, metody fluorescencyjne i szybką polarografię. W celu zbadania wpływu WO_3 NPs na organizację PSII BBY wykorzystano mikroskopię sił atomowych oraz mikroskopię elektronową. Stwierdzono, że heterogeniczność funkcjonowania PSII jest wynikiem zarówno heterogeniczności stanów kompleksu manganowego, jak i dalekozasięgowych oddziaływań sieci wodorowej utworzonej przez białka i cząsteczki wody. Po raz pierwszy uzyskano układ hybrydowy bez dodatkowych nośników wodnych, działający w środowisku wodnym, który wykazuje aktywność porównywalną z naturalnym układem PSII.

Nowo podjętym zagadnieniem były badania ultra cienkich warstw Sn na podłożu Pt(111). Układ ten jest interesujący m.in. ze względu na poprawę właściwości katalitycznych względem czystej platyny, np. dla reakcji utleniania CO oraz reakcji redukcji tlenu. Badano początkowe fazy wzrostu Sn na Pt(111) za pomocą mikroskopu LEEM i zaobserwowano ewolucję powstających nadstruktur wraz ze wzrastającym pokryciem (początkowo $\sqrt{3} \times \sqrt{3} (R30^\circ)$, następnie $c(4 \times 2)$). Obserwacje wzrostu prowadzono również w przestrzeni rzeczywistej i zanotowano silny wpływ struktury tarasów atomowych Pt(111) na organizację atomów Sn.

Podobnie jak w poprzednich latach nasze laboratorium wykonało kilkadziesiąt analiz XPS, których celem było określenie stanu chemicznego i stopnia utlenienia materiałów katalitycznych i innych materiałów funkcjonalnych.

W ramach współpracy z Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego Solaris, grupa zaangażowana była w opiekę nad infrastrukturą aparaturową i pomiary na dwóch liniach badawczych: DEMETER i PIRX. W ramach tej działalności członkowie grupy brali udział w realizacji kilkunastu projektów badawczych, zarówno własnych jak i pochodzących od użytkowników zewnętrznych z Polski i zagranicy.

9. Wspomagane komputerowo projektowanie nanocząstek hybrydowych do zastosowań w teranostyce nowotworowej

(prof. dr hab. Tomasz Pańczyk, prof. dr hab. Wojciech Płaziński, dr Agnieszka Brzyska, dr Paweł Wolski)

Właściwości nanocząsteczek można zmieniać poprzez modyfikację ich powierzchni różnymi ligandami, np. polimerami o różnej strukturze wewnętrznej i składzie chemicznym. W ten sposób możemy dostrajać właściwości cząsteczek w szerokim zakresie, tym samym rozszerzając ich potencjalne zastosowanie w różnych dziedzinach. W niniejszym badaniu analizowano kowalencyjną funkcjonalizację węglowych kropek kwantowych (*ang.* CQD) z dendrymerami poli(amidoaminowymi) (PAMAM) 4-tej generacji, wykorzystując pełnoatomistyczne symulacje dynamiki molekularnej. W szczególności zbadano wpływ strategii szczepienia polimeru (*szczepienie-z* i *szczepienie-do*) oraz stopnia utlenienia CQD na funkcjonalizację. Obliczenia przeprowadzono dla czterech układów CQD-G4 PAMAM. Dwa modele CQD, z 10% i 60% pokryciem krawędzi tlenowymi grupami funkcyjnymi (karboksylowymi i hydroksylowymi), naszczepiono technikami *szczepienia-z* i *szczepienia-do* dwoma dendrymerami G4-PAMAM, umiejscowionymi po przeciwnych stronach nanocząsteczki.

Uzyskane wyniki wykazały, że zakres oraz charakter pokrycia powierzchni CQD przez dendrymery zależą zarówno od metody szczepienia, jak i stopnia utlenienia powierzchni szczepionej. W przypadku metody *szczepienia-z* wzrost stopnia utlenienia CQD prowadził do zmniejszenia powierzchni zakrytej dendrymerami z 70% do 30%. Natomiast w przypadku *szczepienia-do* dendrymery pokrywały około 50% powierzchni CQD, niezależnie od stopnia jej utlenienia. Sugeruje to, że metoda *szczepienia-do* może być bardziej skuteczna w osiągnięciu równomiernego pokrycia powierzchni CQD, niezależnie od liczby tlenowych grup funkcyjnych na powierzchni nanocząsteczki.

Zaobserwowano również, że w przypadku zredukowanej formy CQD dendrymery naszczepione metodą *szczepienia-z* przyjmowały płaską, przypominającą dysk konformację. Z drugiej strony, w przypadku *szczepienia-do*, wzrost liczby monomerów w cząsteczce dendrymeru zwiększył odpychanie steryczne między nimi, w wyniku czego zaobserwowano bardziej rozszerzone konformacje, z dużą liczbą monomerów wznoszących się ponad powierzchnię nanocząsteczki. W przypadku CQD o wyższym stopniu utlenienia, zaadsorbowane polimery przyjmowały bardziej zwartą strukturę, niezależnie od metody naszczepienia. Tę charakterystyczną cechę strukturalną przypisano rosnącym oddziaływaniom elektrostatycznym między protonowanymi pierwszorzędowymi grupami aminowymi dendrymerów a grupami karboksylowymi CQD, co sprzyjało gęstszemu upakowaniu grup końcowych w pobliżu powierzchni CQD.

Obliczona energia oddziaływań oraz liczba wiązań wodorowych wykazały, że wyższy poziom utlenienia CQD zapewnia silniejsze interakcje międzyfazowe pomiędzy dendrymerami a CQD, niezależnie od metody szczepienia. Ponadto, dendrymery naszczepione metodą *szczepienia-z* wykazywały silniejsze oddziaływanie z CQD w porównaniu do metody *szczepienia-do*. W rezultacie wewnątrzcząsteczkowa struktura CQD została lepiej zachowana w przypadku zastosowania tej pierwszej metody szczepienia. Ponadto zaobserwowano, że redystrybucja pozycji końcowych grup dendrymerów, indukowana zwiększeniem stopnia utlenienia CQD, zmniejsza oddziaływania dendrymerów z innymi cząsteczkami (tutaj woda). Sugeruje to, że oddziaływanie nanokompozytu CQD-G4 PAMAM z innymi cząsteczkami może być kontrolowane poprzez dostrojenie siły interakcji polimer-podłoże. Podsumowując, przeprowadzone badania wykazały, że zarówno chemia naszczepianej powierzchni jak i strategia szczepienia polimeru odgrywają kluczową rolę w zarządzaniu zależnościami struktura/właściwość materiałów hybrydowych CQD-G4 PAMAM.

10. Określenie mechanizmów syntezy, struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach stałych

(dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN)

Szorstkość powierzchni monowarstwy cząstek jest jedną z jej podstawowych właściwości, zazwyczaj opisywaną za pomocą widmowej gęstości mocy (power spectral density, PSD). W ramach wykonanych badań wyprowadziliśmy ogólne równanie dla tej funkcji, słuszne również dla układów o skończonych rozmiarach. Wykazaliśmy podobieństwo nowego równania do równań stosowanych w teorii rozpraszania promieniowania. Udowodniliśmy, że PSD jest funkcją liniową kwadratu czynnika kształtu i czynnika struktury statycznej. Czynniki kształtu reprezentuje tu transformata Fouriera profilu wysokości cząstek. Czynniki struktury jest natomiast równy iloczynowi gęstości liczbowej cząstek i transformaty Fouriera funkcji korelacji par obliczonej w skończonym obszarze, powiększonej o jeden. Zależność ta sugeruje, że pomiary szorstkości monowarstw cząstek można uznać za rodzaj spektroskopii w szerszym znaczeniu tego słowa.

Wykazaliśmy także, że nasze wyniki można uogólnić na praktycznie dowolny obraz monowarstwowy. Nasze badania dostarczają więc podstaw teoretycznych dla ilościowej, taniej i łatwej metody eksperymentalnej, opartej na analizie statystycznej cyfrowego obrazu monowarstwy, służącej do określania szorstkości powierzchni i funkcji korelacji par cząstek. Podejście to może stanowić atrakcyjną alternatywę dla standardowych, kosztownych metod eksperymentalnych, takich jak GISANS czy GISAXS. PSD dostarcza również ilościowych informacji o kluczowych parametrach systemu: promieniu cząstki, gęstości liczbowej oraz wymiarach analizowanego obszaru. Dlatego nowy model teoretyczny zapewnia także ogólne ramy dla automatycznej parametryzacji monowarstw cząstek w czasie rzeczywistym. W przeciwieństwie do metod stosowanych obecnie w analizie obrazu, polegających zwykle na identyfikacji poszczególnych cząstek, nie musimy tutaj lokalizować każdej z cząstek. W tym celu wystarczy po prostu obliczyć dyskretną transformatę Fouriera obrazu monowarstwy i dopasować jej parametry metodą najmniejszych kwadratów.

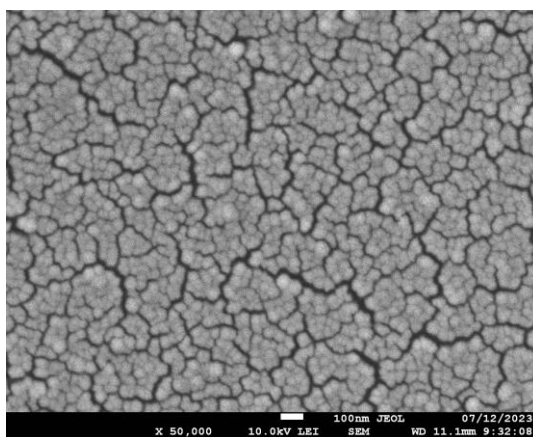
Zademonstrowaliśmy, że nasze wyniki analityczne są zgodne z wynikami numerycznymi uzyskanymi dla układów o parametrach odpowiadających typowym warunkom doświadczalnym. Pokazaliśmy również praktyczne zastosowanie naszego podejścia do analizy spektralnej obrazów monowarstw znalezionych w literaturze.

11. Teranostyczne nanocząstki substancji przeciwnowotworowych

(dr hab. Krzysztof Szczepanowicz, prof. IKiFP PAN, dr Tomasz Kruk, dr Joanna Odrobińska-Baliś, dr Anna Pajor-Świerzy)

Pomimo ogromnego postępu w medycynie, wciąż wiele osób na świecie umiera z powodu braku skutecznych metod diagnozy oraz leczenia nowotworów. Zbyt późna diagnoza czy oporność wielolekowa komórek nowotworowych stanowi poważny problem kliniczny. Głównym problemem jest niska selektywność chemioterapeutyków, co głównie wynika z podania systemowego (ogólnoustrojowego) oraz ze słabej rozpuszczalności w środowisku wodnym (są to głównie substancje hydrofobowe). Zasadnym wydaje się zatem zastosowanie nośników leków przeciwnowotworowych, w celu poprawy biodystrybucji substancji terapeutycznych w ustroju, a tym samym, zwiększenia ich indeksu terapeutycznego. Nanotechnologia stwarza w tym zakresie nowe perspektywy, ponieważ umożliwia docelowy transport leków, a ponadto preparaty leków w postaci nano mogą charakteryzować się unikalnymi właściwościami nie tylko farmakokinetycznymi, ale także farmakodynamicznymi.

W 2023 roku skupiliśmy się na badaniach nanonośników teranostycznych dla celowanej terapii przeciwnowotworowej. Teranostyczne nanonośniki leków przeciwnowotworowych formowano metodą sekwencyjnej adsorpcji naładowanych nanoobjektów, zwaną metodą warstwa po warstwie. Wybrane leki przeciwnowotworowe SN-38, Salinomycyna i Docetaxel, enkapsulowano w wielowarstwowych nanonośnikach typu core@shell zbudowanych z poliaminokwasów poli(L-Lizyny) – PLL, poli(L-Lizyny) znaczonej gadolinem – PLL-Gd, poli(kwasu glutaminowego) – PGA, oraz podstawionego pegiem-PGA – PGA-g-PEG. Rozmiar otrzymanych nanonośników mieścił się w zakresie 80-200 nm. Rysunek 1 przedstawia obraz z mikroskopu cryo-SEM badanych nanonośników. Właściwości opracowanych nanonośników zostały zoptymalizowane pod pasywne dostarczanie leków do niszy nowotworowej, bazując na efekcie EPR. Określona została efektywność działania enkapsulowanych substancji Salinomycyny oraz Docetaxelu na liniach komórkowych 4T1 mammary carcinoma i CT26-CEA murine colorectal carcinoma.. Wykazano, że enkapsulowane leki posiadają swoją wysoką aktywność przeciwnowotworową.



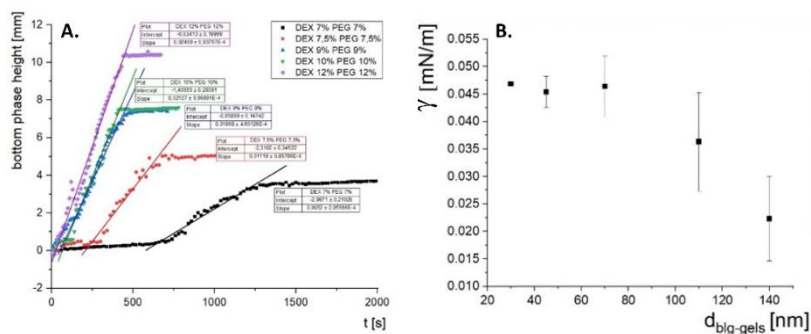
Rysunek 1 Obraz Cryo-SEM badanych nanonośników

12. Kinetyka wyciekania filmów ciekłych w warunkach dynamicznych – eksperyment i modelowanie teoretyczne

(dr hab. Jan Zawala prof. IKiFP PAN, dr inż. Andrzej Baliś, dr Dominik Kosior, dr hab. Georgi Gochev, mgr inż. Agata Wiertel-Pochopień, mgr Mariusz Borkowski, mgr Łukasz Witkowski, mgr Klaudia Zaręba)

Celem zadania jest określenie kinetyki koalescencji kropeł powstających w dwuskładnikowych układach polimerowych (ang. Aqueous Two-Phase Systems - ATPS), które, w określonych proporcjach, ulegają spontanicznej separacji. ATPS to bardzo interesujące układy dwóch niemieszających się ze sobą roztworów wodnych będących w równowadze termodynamicznej. Układy takie są bardzo interesujące z praktycznego punktu widzenia (m. in. w procesach ekstrakcji, separacji, oczyszczania i wzbogacania organelli komórkowych, protein, nanorurek węglowych oraz jonów metali jak również do zastosowań w kontrolowanym dostarczeniu leków), a ich największą zaletą jest wysoki poziom biokompatybilności (brak fazy organicznej jak w konwencjonalnych emulsjach typu olej-woda O/W). Podstawowym problemem w zastosowaniu ATPS i wytworzonych z nich emulsji oraz kapsułek do celowego dostarczania leków jest niski stopień stabilności dyspersji, spowodowany ekstremalnie niskim napięciem międzyfazowym. Prace badawcze zaplanowane w niniejszym zadaniu mają na celu poszukiwanie efektywnych stabilizatorów układów ATPS, które znacznie rozszerzyłyby zakres ich stosowania i funkcjonalność.

W okresie sprawozdawczym przeprowadzono pomiary stabilności rzeczywistych emulsji typu ATPS, które otrzymywano mieszając glikol polietylenowy (PEG) oraz dekstran (DEX) w odpowiednich proporcjach. Do badań wybrano polimery o różnych masach cząsteczkowych (M_w). Stwierdzono, że im większa była różnica w M_w obu polimerów tym otrzymana emulsja charakteryzowała się większą stabilnością. Stabilność ta jednak nie była zadawalająca (patrz rys. 1A), co spowodowane było brakiem odpowiedniego stabilizatora, mogącego zapobiec zjawisku koalescencji, które prowadziło każdorazowo do rozwarstwiania się układu. Jako stabilizator wybrano nanożelowe cząstki proteiny BLG (beta-laktoglobuliny), które otrzymano w trakcie zoptymalizowanej syntezy. Dzięki precyzyjnej kontroli pH podczas syntez otrzymano monodispersyjne cząstki, których rozmiary ($d_{blg-gels}$) mieściły się w zakresie 30-130 nm. Dodatek określonego stężenia nanocząstek do roztworu jednego z polimerów przed procesem emulsyfikacji spowodował spektakularny wzrost stabilności emulsji, który był największy dla cząstek o rozmiarach 50-80 nm. W celu zbadania mechanizmu tego zjawiska przeprowadzono pomiary napięć międzyfazowych (γ) układów polimerowych z dodatkiem nanocząstek za pomocą metody wirującej kropli (patrz rys. 1B). Pomiary wykazały, że brak jest korelacji pomiędzy stopniem obniżenia napięcia międzyfazowego, powodowanego przez określony rozmiar nanocząstek, a stabilnością emulsji, zatem mechanizm stabilizacji jest w tym przypadku bardziej złożony. Kolejne, zaplanowane badania (między innymi obserwacja tworzenia się warstwy adsorpcyjnej w obszarze międzyfazowym kropeł za pomocą mikroskopu konfokalnego), będą miały na celu wyjaśnienie wpływu rozmiaru stabilizatora na właściwości badanych ATPS.

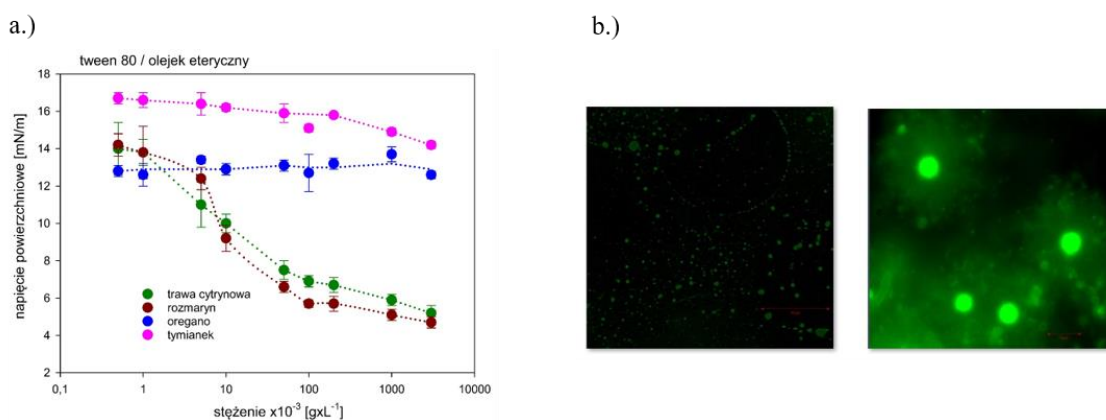


Rys. 1. Wykresy przedstawiające (A): kinetyki rozwarstwiania się emulsji typu ATPS w zależności od różnicy w masach cząsteczkowych zmieszanych polimerów oraz (B): wartości napięć międzyfazowych uzyskanych metodą wirującej kropli, w zależności od rozmiaru nanocząstek stabilizatora

13. Naturalne i modyfikowane polisacharydy jako stabilizatory filmów powierzchniowych, pian i emulsji

(dr Ewelina Jarek, prof. dr hab. Piotr Warszyński, dr hab. Marta Kolasińska Sojka, dr Marcel Krzan, dr Lilianna Szyk-Warszyńska, inż. Marzena Noworyta)

W ramach zadania statutowego, badano właściwości powierzchniowe układów w których polisacharydy: chitozan-polikation oraz furcelleran-polianion w fazie wodnej tworzyły emulsje z roślinnymi olejkami eterycznymi (z oregano, tymianku, rozmarynu oraz trawy cytrynowej) o dużym potencjale aplikacyjnym ze względu na ich antybakteryjne i antyoksydacyjne właściwości. Zmierzone napięcia powierzchniowe na granicy faz: woda/olejek oraz wodny roztwór polisacharydu/olejek miały podobne wartości 15 ± 1 mN/m. Celem obniżenia napięcia i ułatwienia procesu emulsyfikacji dodano niejonowy surfaktant Tween 80, który jednak obniżył napięcie powierzchniowe tylko układów z olejkami z rozmarynu i trawy cytrynowej, nie miał istotnego wpływu na napięcie powierzchniowe na granicy faz z olejkami z oregano i tymianku (Rys. 1).



Rys. 1.a. Zależność równowagowego napięcia powierzchniowego od stężenia surfaktantu Tweenu 80 na granicy faz roztwór surfaktantu/olejek eteryczny. b. Obraz z mikroskopu konfokalnego emulsji zawierającej 1000 ppm chitozanu w 1% kwasie octowym w obecności Tweenu 80 i olejku z oregano.

Zebrane widma IR olejków eterycznych potwierdziły znaczące różnice w strukturze związków, które wchodzi w ich skład (między innymi obecność grup OH w olejku z oregano i tymianku). Obrazy z mikroskopu konfokalnego w przypadku układu chitozan/oregano pokazują obecność w pobliżu granicy faz charakterystycznych struktur (Rys.1). Badania będą kontynuowane celem wyjaśnienia mechanizmu tworzenia się takich kompleksów. Ponadto wykonano uzupełniające badania aktywności powierzchniowej chitozanu modyfikowanego hydrofobowymi łańcuchami węglowodorowymi o różnej długości (C8, C12, C16) oraz zbadano, jak długość łańcucha węglowodorowego oraz sposób łączenia ze szkieletem polisacharydu, poprzez wiązanie amidowe lub estrowe wpływa na zwilżalność i energię powierzchniową multiwarstwy polielektrolitowej zawierającej modyfikowany polisacharyd.

14. Nowe materiały elektrolitowe do ogniw paliwowych elektrolitem ze stałego tlenku o obniżonej temperaturze pracy

(dr hab. Michał Mosiałek, dr inż. Grzegorz Mordarski, mgr inż. Amir Sultan)

Grupa Elektrochemii w Zespole Nanostruktur Materii Miękkiej prowadziła badania nad nowymi materiałami do ogniw paliwowych z elektrolitem ze stałego tlenku. Wysoka temperatura spiekania tlenków mieszanych $\text{BaCe}_{1-x-y}\text{Zr}_y\text{Y}_{0,1}\text{O}_3$ generuje wysokie koszty ich otrzymywania jak również utrudnia otrzymywanie porowatych materiałów na elektrody w postaci kompozytów z tlenkami mieszanymi wykazującymi przewodnictwo jonowo-elektronowe o znacznie niższej temperaturze spiekania.

Celem badań prowadzonych w 2023 roku było wytworzenie materiałów elektrolitowych na bazie $\text{BaCe}_{1-x-y}\text{Zr}_y\text{Y}_{0,1}\text{O}_3$ o obniżonej temperaturze spiekania oraz zbadanie ich przewodnictwa jonowego metodami elektrochemicznymi. Na podstawie analizy literatury stwierdziliśmy, że niewielkie dodatki innych tlenków metali a zwłaszcza miedzi mogą znacznie obniżyć temperaturę spiekania. Otrzymane materiały elektrolitowe $\text{BaCe}_{1-x-y-t}\text{Zr}_y\text{M}_t\text{Y}_{0,1}\text{O}_3$ (M = dodany metal) zostały scharakteryzowane za pomocą dostępnych metod fizykochemicznych, m. in. XRD, SEM-EDS, TG-DSC oraz testów elektrochemicznych.

$\text{BaCe}_{0,5}\text{Zr}_{0,3}\text{Y}_{0,2}\text{O}_3$ -delta (BCZY), uważany za jeden z najbardziej obiecujących elektrolitów przewodzących protony, przysparza trudności ze względu na wysoką temperaturę spiekania. Aby rozwiązać tę wadę, wyprodukowano elektrolit $\text{BaCe}_{0,56}\text{Zr}_{0,2}\text{Ni}_{0,04}\text{Y}_{0,2}\text{O}_3$ -delta (BCZY) domieszkowany w pozycji B. Zbadano wpływ dodatku Ni na właściwości elektryczne i parametry spiekania. Poprzez dodanie Ni w pozycji B BCZY uzyskano znaczny spadek temperatury spiekania, tj. z 1600 °C (dla BCZY) do 1300 °C (dla BCZMY). Dla elektrolitu BCZMY w wilgotnym środowisku azotowym zaobserwowano przewodność $0,05 \text{ S cm}^{-1}$ w temperaturze 700 °C. Ponadto $\text{SrFe}_{0,8}\text{Mo}_{0,2}\text{O}_3$ -delta (SFM) wykorzystano jako symetryczny materiał elektrodowy ze względu na wysoką przewodność jonową i elektronową. Elektroda SFM została zsyntetyzowana w procesie spalania i wykazała odpowiednią kompatybilność chemiczną i termiczną z elektrolitami BCZY i BCZMY do 1100 °C. Jednofazowa struktura sześcienna wraz z morfologią powierzchni symetrycznych ogniw opartych na proponowanych elektrolitach została potwierdzona za pomocą dyfrakcji rentgenowskiej i skaningowej mikroskopii elektronowej. Przeprowadzono elektrochemiczną spektroskopię impedancyjną w celu określenia obszarowej rezystancji polaryzacji (ASR). Najniższe wartości ASR 0,037, 0,081 i $0,327 \text{ } \Omega \text{ cm}^{-2}$ w temperaturze 800, 700 i 600 °C w zwilżonym wodorze uzyskano dla elektrody kompozytowej SFM-BCZNY. Symetryczne ogniwo osiągnęło szczytową gęstość mocy 254 mW cm^{-2} (konfiguracja ogniwa; SFM-BCZMY | BCZMY | SFM-BCZMY) w temperaturze 800 °C. Urządzenia z ogniwami paliwowymi w przedstawionej konfiguracji wykazały długotrwałą stabilność przez 100 h w temperaturze 700 °C pod obciążeniem 120 mA cm^{-2} . Biorąc pod uwagę przedstawione wyniki, BCZMY jest obiecującym elektrolitem protonowym dla IT-SOFC.

15. Wpływ silnego odkształcenia Mg na właściwości warstw fosforanowych

(*dr inż. Konrad Skowron, dr inż. Grzegorz Mordarski, dr hab. Małgorzata Zimowska*)

W roku 2023 skupiono się na trzech rodzajach powłok konwersyjnych: fosforanowej (CaP), polilaktydowo-polilaktydowej (PLA) oraz kombinowanej powłoce CaP-PLA na powierzchni stopu magnezu WE43. Do scharakteryzowania morfologii powierzchni i powierzchni międzyfazowej, a także składu powłok przed i po eksperymentach korozyjnych wykorzystano skaningową mikroskopię elektronową, dyfrakcję promieni rentgenowskich, rentgenowską spektroskopię fotoelektronów i spektroskopię w podczerwieni. Właściwości ochronne otrzymanych powłok zbadano metodą polaryzacji potencjodynamicznej oraz badaniami zanurzeniowymi w roztworze Hanks'a. Wyniki pozwoliły zaproponować mechanizm osadzania powłok i ich degradacji korozyjnej.

W długotrwałych doświadczeniach korozyjnych warstwa CaP nie uległa znaczącym zmianom strukturalnym, morfologicznym i fazowym. Jednakże ze względu na lokalne defekty powłoki (pęknięcia, pory) zaobserwowano kilka lokalnych plam korozyjnych, co jest zgodne ze wzrostem pH roztworu Hanks'a.

Osadzanie warstwy PLA na powierzchni stopu WE43 powoduje utworzenie pozbawionej defektów powłoki polimerowej o grubości około 20 μm . Szybkość korozji stopu WE43 poddanego obróbce w roztworze Hanks'a spadła 100-krotnie. Jednakże ze względu na dużą przepuszczalność wody i niską przyczepność do podłoża, powłoka ta nie zapewnia ochrony antykorozyjnej podłoża w dłuższej perspektywie czasu.

Dwuskładnikowa powłoka CaP-PLA zapewniła zwiększoną odporność na korozję w roztworze Hanks'a przez 14 dni w porównaniu do nieobrobionego stopu WE43. Po długotrwałych badaniach korozyjnych w roztworze Hanks'a dwuwarstwowa powłoka nie wykazała widocznych zmian strukturalnych, a pH roztworu praktycznie nie zmieniało się w czasie, co świadczy o wysokich właściwościach ochronnych powłoki CaP-PLA.

Równolegle przeprowadzono badania wpływu silnego odkształcenia na właściwości stopu magnezu AZ91 T6. Elektrochemiczne badania stopu AZ91 poddanego powierzchniowej, mechanicznej obróbce ściernej (SMAT) prowadzone były w 0.05 M NaCl przez 24 godziny.

Wyniki elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej pokazały, że dla stopu AZ91 poddanego obróbce mechanicznej wartości rezystancji polaryzacyjnej rosną wraz z czasem immersji w roztworze NaCl i po 10 godzinach osiągają wartości znacznie większe niż te zmierzone dla nieodkształconych referencyjnych próbek stopu AZ91. Po ponad 20 godzinnej immersji w roztworze NaCl wyznaczone wartości rezystancji dla próbek poddanych SMAT są zbliżone do tych otrzymanych dla próbek referencyjnych.

Przeprowadzono długoczasowe (168 g) testy wydzielania wodoru w roztworze 3.5 % NaCl dla próbek AZ91 poddanych obróbce SMAT oraz próbek referencyjnych. Testy wydzielania wodoru wykazały, że dla próbek poddanych odkształceniu wydzielanie wodoru było nieznacznie mniejsze niż dla próbek referencyjnych.

Proces SMAT wpływa na zachowanie badanego stopu magnezu podczas korozji, czyniąc go bardziej reaktywnym, co z kolei powoduje przyspieszenie tworzenia się warstwy produktów utleniania na jego powierzchni w trakcie immersji w roztworach NaCl. To z kolei prowadzi do poprawy jego odporności na korozję w pierwszych godzinach immersji.

16. Molekularne aspekty stabilności konformacyjnej białek w kontekście tworzenia superstruktur amyloidowych

(prof. dr hab. inż. Barbara Jachimska, dr Agnieszka Kamińska, mgr inż. Magdalena Szota, mgr inż. Lukasz Luśtyk)

Badania nad rozwojem choroby Parkinsona wykazały, że charakteryzuje się ona obecnością ciał Lewy'ego zawierających głównie α -synukleinę. W ciałach Lewy'ego α -synukleina jest nieprawidłowo sfalutowana i może powodować śmierć neuronów. Zrozumienie, w jaki sposób rozpuszczalne białka tworzą formy amyloidowe i uruchamiają szlak toksyczności komórkowej, stanowi podstawę opracowania skutecznych terapii w chorobie Alzheimera, Parkinsona czy Creutzfeldta-Jakoba. Należy podkreślić, że kontrola zmian w obrębie struktury białek amyloidowych na poziomie molekularnym, a tym samym identyfikację kluczowych elementów inicjalizujących kaskadę zmian prowadzących finalnie do powstawania chiralnych superstruktur jest nadal niewystarczająco poznana. Niedawno odkryto, że białka odpowiedzialne za choroby neurodegeneracyjne oddziałują elektrostatycznie z ujemnie naładowanymi glikolipidami znajdującymi się na powierzchni komórek nerwowych. Ponieważ oddziaływania elektrostatyczne wydają się być jednym z kluczowych czynników przyczyniających się do agregacji układów białkowych na powierzchni błony komórkowej, badania prowadzono przy kontroli potencjału elektrycznego oraz gęstości ładunku powierzchniowego. Wykorzystując zaawansowane metody analityczne, monitorowano *in situ* transformację formy monomerycznej w agregaty białkowe w roztworze oraz na powierzchni międzyfazowej naśladując warunki panujące podczas agregacji białek w komórkach i tkankach. Zastosowanie skoordynowanego podejścia metodologicznego, obejmującego zastosowanie mikrowagi kwarcowej (QCM-D), powierzchniowego rezonansu plazmonowego (MP-SPR), spektroskopii w podczerwieni (IR), pozwala zrozumieć przebieg procesu biochemicznego na poziomie submolekularnym. Widma dichroizmu kołowego (CD) oraz spektroskopii w podczerwieni (IR) potwierdziły, że oddziaływanie białka z powierzchnią indukuje istotne zmiany konformacyjne. Kierunek i intensywności zmian strukturalnych, zależy od wielu czynników, między innymi od pH środowiska w którym prowadzono badania.

Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury

17. Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki środowiska w ich otoczeniu

(dr Marcin Strojcki, dr Sergii Antropov, prof. dr. hab. Lukasz Bratasz)

Działalność badawcza prowadzona w ramach zadania miała na celu opracowanie kompleksowego modelu osiadania cząstek pyłu na powierzchniach wewnętrznych w zabytkowych budynkach. Model uwzględnia najważniejsze procesy osiadania obserwowane w obiektach zabytkowych takich jak dyfuzję Browna i turbulentną, osiadanie grawitacyjne, turboforezę i termoforezę. W porównaniu od istniejących modeli teoretycznych zaproponowany model stanowi znaczące osiągnięcie poznawcze gdyż:

- szybkość depozycji cząstek jest wyrażona jest jako funkcja ważnych parametrów charakteryzujących zabytkowe wnętrza takich jak prędkości tarcia – uwzględniająca wpływ intensywności przepływu powietrza w pomieszczeniu - różnica temperatur pomiędzy powietrzem a powierzchnią oraz jej szorstkością,
- wszystkie zależności użyte w modelu sparametryzowane zostały temperaturą powietrza oraz wielkością i gęstością cząstek,
- zaproponowano nową formułę lepkości turbulentnej powietrza oraz członu termoforetycznego w celu uwzględnienia ważnego mechanizmu brudzenia powierzchni, który często jest spowodowany dużymi różnicami temperatur pomiędzy powietrzem a powierzchniami w budynkach zabytkowych. Przyjęta postać pozwoliła na obliczenie gradientów temperatury aż do małych odległości od powierzchni i wykazała nieistotną zależność gradientu temperatury od średnicy cząstek, co dało miarodajny opis fizyczny procesu.

Przeprowadzono walidację opracowanego modelu poprzez porównanie z wynikami poprzednich modeli oraz istniejącymi w literaturze danymi eksperymentalnymi. Model wykorzystano do symulacji całkowitej prędkości osiadania w małym kościele na przykładzie budynku zabytkowego z ogrzewaniem działającym w okresie zimnym. W symulacjach wykorzystano dwie skrajne wartości prędkości tarcia przyjęte dla obiektów zabytkowych - 1 i 6 cm/s, oraz dwa skrajne stopnie chropowatości powierzchni - gładką tapetę i szorstki tynk ścienny, natomiast różnica temperatur pomiędzy powierzchnią wewnętrzną a powietrzem wahała się od -3 do 2°C .

Model odpowiednio przewiduje procesy osiadania obserwowane w budynkach zabytkowych i udowodnił, że jest w stanie poprawnie odwzorować prędkości osiadania cząstek dla określonych orientacji powierzchni w funkcji gradientu temperatury powietrze-powierzchnia, szorstkości powierzchni i natężenia przepływu powietrza odzwierciedlonego w prędkości tarcia. Jednym z podstawowych osiągnięć poznawczych jest wykazanie, istniejące przekonanie o możliwości znacznego ograniczenia depozycji cząstek pyłu poprzez ogrzanie powierzchni nie jest prawdziwe dla typowych powierzchni architektonicznych tj. powierzchni o dużej szorstkości. Model znacząco pogłębia podstawową wiedzę na temat jednego z kluczowych zagrożeń środowiskowych dla wnętrz zabytkowych tj. szybkości brudzenia powierzchni architektonicznych i cennego wyposażenia wnętrz. Umożliwia także interpretację coraz większej ilości badań środowiska wewnętrznego w różnorodnych budynkach historycznych. Dlatego też opracowanie może posłużyć do opracowywania nowych metod ochrony obiektów przed brudzeniem, przez konserwatorów i zarządców obiektów zainteresowanych oceną i łagodzeniem zagrożeń środowiskowych dla różnych typów wnętrz zabytkowych.

Grant Rozwojowy

18. Zeolity o strukturze fojazytu zawierające miedź jako modyfikatory materiałów wybuchowych opartych na ANFO

(dr inż. Łukasz Kuterasiński)

Projekt Rozwojowy IKiFP PAN nr 2/GR/2020 [2021-2023]

Temat dotyczący wytwarzania, modyfikacji oraz zastosowania materiałów wybuchowych jest szczególnie ważny ze względu na ich pokojowe zastosowania. Jednym z najczęściej stosowanych materiałów wybuchowych w przemyśle cywilnym (szczególnie w górnictwie) jest ANFO (z ang. Ammonium Nitrate Fuel Oil). Materiały wybuchowe oparte na ANFO charakteryzują się dobrymi właściwościami strzałowymi, a procedura ich wytwarzania jest stosunkowo tania i łatwa.

Właściwości strzałowe otrzymanych materiałów wybuchowych mogą ulegać modyfikacji poprzez zmianę ich składu chemicznego, co może być zrealizowane poprzez dodatek modyfikatorów, które mogą katalizować rozkład materiałów wybuchowych, redukować emisję gazów postrzałowych oraz wpływać na ich czułość. Zabieg ten pozwala na otrzymanie materiałów wybuchowych o pożądanym właściwościach strzałowych, np. o odpowiedniej prędkości detonacji, ciepła oraz sile eksplozji, czy też toksyczności gazów postrzałowych.

W obecnych badaniach zastosowano zeolit o strukturze fojazytu zawierający miedź (Cu-FAU) jako modyfikator ANFO ze względu na możliwość sterowania składem chemicznym gazów postrzałowych, co wynika z powszechnie znanego zastosowania zeolitów zawierających miedź jako katalizatory do procesów DeNO_x . Wybór zeolitu o strukturze fojazytu (FAU) wynika z jego szerokiego zastosowania w przemyśle chemicznym, co z kolei ma związek z jego unikalnymi właściwościami chemicznymi i porowatymi.

Zeolit dodano do ANFO na drodze mieszania. Zawartość masowa zeolitu w otrzymanych próbkach ANFO nie przekraczała 5%. Bezpośrednio przed zmieszaniem ANFO z zeolitem, fojazyt w formie protonowej (HFAU) impregnowany był związkami miedzi, w taki sposób, że wagowa zawartość Cu nie przekraczała 5% wagowych w stosunku do otrzymanej próbki ANFO.

Przygotowane próbki ANFO podlegały charakterystyce fizykochemicznej, z uwzględnieniem ich krystaliczności, struktury (Dyfrakcja Fal Rentgenowskich, Spektroskopia Fourierowska w Podczerwieni), stanu powierzchni, morfologii (Mikroskopia Sił Atomowych, Skaningowa Mikroskopia Elektronowa), właściwości termicznych (Termogravimetria oraz Różnicowa Kalorymetria Skaningowa), właściwości strzałowych (z uwzględnieniem prędkości detonacji, gęstości, ciśnienia oraz temperatury detonacji, ciepła oraz siły eksplozji, jak również analizy gazów postrzałowych).

Analiza zarówno obrazów dyfrakcyjnych jak i widm w podczerwieni wykazała obecność krystalicznego azotanu amonu (V) - AN. Wprowadzenie Cu-FAU do AN skutkowało pojawieniem się nowych sygnałów przypisanych do fazy zeolitowej. Intensywności zarówno refleksów jak również pasm związanych z zeolitami wzrastała wraz z ich zawartością w próbkach ANFO.

Dodatek Cu-FAU do ANFO powodował również wyraźne zmiany w stanie powierzchni otrzymanych próbek ANFO. Analiza z zastosowaniem Mikroskopii Sił Atomowych wykazała pojawienie się licznych ziaren o nieregularnych kształtach na powierzchni AN, co związane było z obecnością fazy zeolitowej. Jednocześnie stwierdzono wyraźny spadek pofałdowania powierzchni badanych próbek ANFO. Dodatek miedziowego fojazytu obniżył również efekt termiczny towarzyszący rozkładowi AN z 5.82 mW/mg (dla czystego ANFO) do 2.82 mW/mg.

Na podstawie obliczeń termodynamicznych właściwości strzałowych otrzymanych materiałów wybuchowych stwierdzono, że zastosowanie Cu-FAU jako modyfikatora ANFO doprowadziło do poprawy właściwości detonacyjnych materiałów wybuchowych opartych na ANFO. Korelowało to ze zmianami stanu powierzchni oraz właściwości termicznych badanych próbek ANFO. Wykazano także, że we wszystkich przypadkach dodatek Cu-FAU do ANFO spowodował wzrost ciśnienia oraz temperatury detonacji odpowiednio aż o 15% i 33%. Ciepło eksplozji oraz prędkość detonacji wzrosły odpowiednio o 50% i 5%. Jednocześnie, całkowita objętość gazów postrzałowych (z uwzględnieniem CO_x , NO_x , oraz pary wodnej) zredukowana została o 6%.

Projekty badawcze NCN „Sonata Bis”

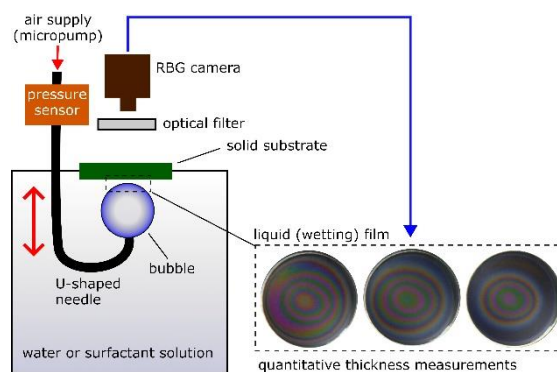
1. Synergistyczne efekty mieszanych roztworów bit-surfaktantów w stabilności filmów ciekłych w warunkach dynamicznych- badania podstawowe o potencjale aplikacyjnym we flotacyjnym procesie separacji

Projekt badawczy „SONATA BIS” NCN 2020/38/E/ST8/00173 [2021-2025]

(kierownik projektu: dr hab. Jan Zawala, prof. IKiFP)

Celem projektu są badania o charakterze podstawowym, mające na celu wyjaśnienie powodu i warunków istnienia efektów synergistycznych wybranych mieszanych odczynników flotacyjnych, które mogą występować podczas tworzenia i wyciekania filmów ciekłych powstających w warunkach dynamicznych, a więc mogą mieć wpływ na stabilność cienkich warstw. Do badań nad zjawiskiem synergii wybrano surfaktanty będące pochodnymi aminokwasów, których roztwory zawierają dodatek prostego surfaktantu niejonowego jak również mikrocząstki polimerowe.

W okresie sprawozdawczym zaprojektowano oraz wykonano układ eksperymentalny, który pozwala na bezpośredni pomiar grubości filmów pianowych i zwilżających metodą interferometryczną w warunkach dynamicznych (ang. Dynamic Fluid-Film Interferometry - DFI). W tym celu zintegrowano zakupione elementy optyczne i elektroniczne w kompaktowe urządzenie, którego poszczególne elementy zsynchronizowano za pomocą odpowiedniego oprogramowania, posiadającego przyjazny użytkownikowi interfejs graficzny. Zasada działania urządzenia polega na wytworzeniu pęcherzyka powietrza o kontrolowanej objętości (średnicy) na igle stalowej pod powierzchnią międzyfazową (roztwór/powietrze, w przypadku badania stabilności filmów zwilżających lub roztwór/ciało stałe, w przypadku filmów zwilżających) i automatycznym dociśnięciu pęcherzyka do granic faz z określoną siłą, powodującą wyciekanie filmu, tj. cienkiej warstwy cieczy rozdzielającej kontaktujące się ze sobą powierzchnie. Dzięki zastosowaniu czujnika ciśnienia, można kontrolować wzrost ciśnienia wewnątrz pęcherzyka i w ten sposób kontrolować siłę docisku, która wpływa na szybkość wyciekania, determinując deformację pęcherzyka tj. promień powstającego filmu. W ten sposób można obserwować utworzony film i w sposób bezpośredni mierzyć jego grubość, a co za tym idzie określać wpływ warunków fizykochemicznych na jego stabilność. Jest to możliwe, dzięki zastosowaniu układu optycznego, wyposażonego w odpowiedni obiektyw, filtr przepuszczający tylko trzy określone długości fali, kamerę cyfrową oraz oświetlenie LED. Testy utworzonego urządzenia potwierdziły jego ogromny potencjał. Dzięki opracowanemu układowi eksperymentalnemu możliwe będzie prowadzenie badań mających na celu nie tylko jakościową ocenę stabilności filmów ciekłych, ale także badanie mechanizmu ich pęknięcia oraz porównanie kinetyki wyciekania w różnych warunkach, w zależności od zaplanowanej zmiany czynników zewnętrznych. Schematyczną ilustrację geometrii urządzenia oraz uzyskane zdjęcia filmów, obrazujące proces wyciekania, przedstawiono na rys. 1.



Rys. 1. Schematyczna ilustracja opracowanego, automatycznego układu do obserwacji i pomiaru grubości pojedynczych filmów ciekłych (przedstawione zdjęcia filmów dotyczą filmu zwilżającego, utworzonego pomiędzy pęcherzykiem a powierzchnią szkła w czystej wodzie).

2. Topologia spotyka magnetyzm: związki na bazie Sn dla sterowanych magnetyzacją przejść topologicznych (TopoTin)



Projekt badawczy „SONATA BIS” NCN 2022/46/E/ST3/00184 [2023-2028]
(kierownik projektu: dr Ewa Młyńczak)

Projekt TopoTin został rozpoczęty 15.03.2023 roku, więc z końcem 2023 mamy za sobą około 9 miesięcy realizacji projektu. Realizacja projektu przebiega zgodnie z założonym planem, jesteśmy w trakcie wykonywania zadań przewidzianych w planie w pierwszym roku projektu. W ramach projektu dostosowaliśmy komorę preparacyjną w układzie ultrawysokiej próżni do przeprowadzania depozycji warstw Fe_xSn_y metodą epitaksji z wiązek molekularnych. W grudniu uruchomiliśmy również mikroskop sił atomowych z możliwością pomiarów sił magnetycznych w zewnętrznym polu magnetycznym, zakupiony ze środków projektu.

Zadaniami przewidzianymi w projekcie w pierwszym roku jego realizacji były:

(A1) Opracowanie preparatyki wzrostu warstw Sn, Fe_3Sn , FeSn oraz Fe_3Sn_2 na podłożach przewodzących. Tutaj dotychczas skupiliśmy się na wzroście ultracienkich warstw Sn oraz Fe_3Sn na metalicznym podłożu Pt(111). Depozycja warstw prowadzona była metodą epitaksji z wiązek molekularnych, a badania wzrostu prowadzone były początkowo z wykorzystaniem standardowego instrumentu do dyfrakcji elektronów niskoenergetycznych (LEED), a następnie z wykorzystaniem mikroskopu na elektronach niskoenergetycznych (LEEM), zarówno w przestrzeni rzeczywistej jak i w przestrzeni odwrotnej. Dodatkowo badaliśmy wzrost warstw Fe_3Sn_2 na podłożu z domieszkowanego InSb(111), który ma charakter metaliczny. Badaliśmy stechiometrię otrzymanych próbek za pomocą metody spektroskopii fotoelektronów (XPS) oraz ich strukturę krystaliczną z użyciem dyfrakcji promieniowania X (XRD). Rozpoczęliśmy też realizację zadania (A4), które było pierwotnie planowane do realizacji w ostatnim roku projektu, tj. wzrost wybranych struktur na podłożach izolujących. Tutaj wykorzystaliśmy podłoże MgO(111) do wzrostu warstwy Fe_3Sn_2 .

(B1) Pomiary właściwości magnetycznych warstw FeSn oraz Fe_3Sn_2 . W celu realizacji tego zadania wykonaliśmy pomiary za pomocą magnetoptycznego efektu Kerra (MOKE), spektroskopii elektronów konwersji (CEMS) oraz mikroskopii fotoemisyjnej (PEEM, mikroskop działający w synchrotronie Solaris na linii DEMETER) na warstwach Fe_3Sn_2 naniesionych na InSb(111) oraz MgO(111). Potwierdziliśmy istnienie porządku ferromagnetycznego w otrzymanych warstwach w temperaturze pokojowej oraz występowanie pełnej remanencji dla próbek naniesionych na InSb(111).

(C1) Pomiary elektronowej struktury pasmowej warstw Sn, Fe_3Sn , FeSn oraz Fe_3Sn_2 . W celu realizacji tego zadania przeprowadziliśmy pomiary z wykorzystaniem kątowno-rozdzielczej spektroskopii (ARPES) na linii Phelix w synchrotronie Solaris. Do tej pory przeprowadziliśmy pomiary dla warstw Sn oraz Fe_3Sn_2 naniesionych na InSb(111).

(C') Obliczenia teoretyczne struktury pasmowej za pomocą metody DFT. To zadanie prowadzone jest w międzynarodowej kooperacji z Dr Gustavem Bihlmayerem z Instytutem Petera Grünberga PGI-1. Do tej pory zrealizowane zostały obliczenia struktury elektronowej Fe oraz warstwy Sn naniesionej na Pt(111).

Projekty badawcze NCN „Sonata”

1. Od pojedynczej cząsteczki do inteligentnego materiału - zrozumienie tworzenia się i właściwości kompleksów polipeptydów

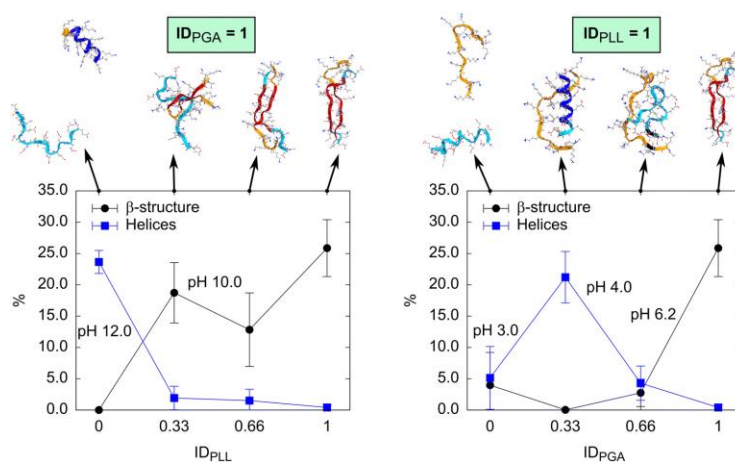
Projekt badawczy "SONATA" NCN 2018/31/D/ST5/01866 [2019-2024]

(kierownik projektu: dr hab inż. Piotr Batys)

Do określenia wpływu pH na mechanizm kompleksowania i właściwości kompleksów poli(L-lizyny) (PLL) i poli(kwasu L-glutaminowego) (PGA) wykorzystano obszerną charakterystykę eksperymentalną, połączoną z symulacjami dynamiki molekularnej. Do wyznaczenia efektywnego ładunku i innych właściwości fizykochemicznych kompleksów wykorzystano kombinację dynamicznego rozpraszania światła (DLS) oraz dopplerowskiej anemometrii laserowej (LDV), do badań termodynamiki procesu kompleksowania zastosowano izotermiczną kalorymetrię miareczkową (ITC), natomiast do określenia zmian w strukturze drugorzędowej polipeptydów i ich kompleksów zastosowano metodę dichroizmu kołowego (CD). W celu lepszej analizy i interpretacji danych zastosowano ultrawirówkę analityczną (AUC), pozwalającą określić dokładne masy cząsteczkowych polipeptydów. Symulacje dynamiki molekularnej (MD) pozwoliły na ilościowe określenie wewnętrznej i zewnętrznej kompensacji ładunku, roli wiązań wodorowych oraz zmian struktury drugorzędowej. Umożliwiło to interpretację danych eksperymentalnych a także wyjaśnienie mechanizmu kompleksowania PLL/PGA w zależności od pH, na poziomie molekularnym.

Otrzymane wyniki wykazały, że ładunek efektywny peptydu jest najważniejszym czynnikiem wpływającym na kompleksowanie PLL i PGA. Kompleksowanie zachodziło w zakresie pH od 4 do 10, co odpowiada warunkom, gdy jeden z polipeptydów jest przynajmniej częściowo naładowany. Mniej intuicyjne są zmiany struktury drugorzędowej (Rysunek 1), które zachodzą w wyniku zmian pH ale także samego procesu kompleksowania, co potwierdzają wyniki CD oraz symulacje MD. Otrzymane wyniki wskazują, że struktury drugorzędowe kompleksów PLL/PGA w wysokim stopniu zależą od efektywnego ładunku polipeptydu. W zakresie pH od 4 do 10, gdzie polipeptydy były przynajmniej częściowo naładowane, po skompleksowaniu zaobserwowano wzrost udziału struktury β -kartki w strukturach drugorzędowych. Zależną od pH zmienność, wskazującą na wieloetapowy proces asocjacji pomiędzy PLL i PGA, zaobserwowano także w pomiarach ITC. Ponadto zauważono, że trendy w kompleksowaniu są asymetryczne w odniesieniu do pH, co zostało dalej wyjaśnione, za pomocą symulacji MD, różnicami w ilości wiązań wodorowych między PGA i PLL. Wykazano również, że wzrost ilości międzycząsteczkowych wiązań wodorowych pomiędzy polipeptydami jest ściśle związany z tworzeniem struktury β -kartki.

Niniejsze badania dostarczyły pełnej charakterystyki fizykochemicznej polipeptydów a także procesu ich kompleksowania w zależności od pH. Ponadto, określono i wyjaśniono zmiany struktury drugorzędowej, umożliwiające jej kontrolę. Otrzymane wyniki dostarczają wskazówek dotyczących projektowania kompleksów PLL/PGA o zadanych właściwościach, ale także innych materiałów na bazie polipeptydów.



Rysunek 1. Zawartość struktury drugorzędowej (%) oraz reprezentatywne zdjęcia z symulacji MD dla różnych stopni jonizacji (ID) PLL i PGA.

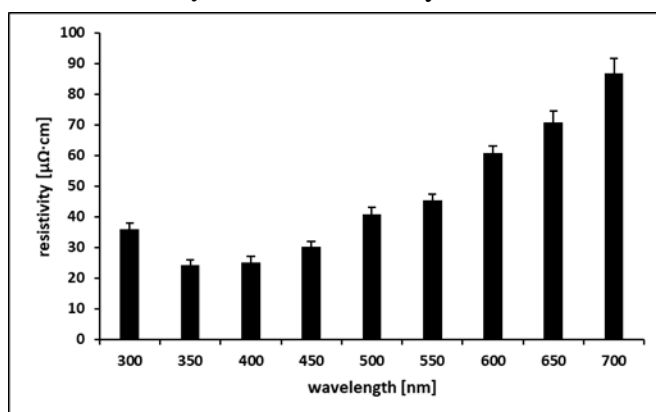
2. Udoskonalenie przewodnictwa drukowanych ścieżek poprzez optymalizację procesu syntezy oraz właściwości fizykochemicznych nanocząstek metali

Projekt badawczy "SONATA" NCN 2020/39/D/ST5/01937 [2021-2024]

(kierownik projektu: dr Anna Pajor-Świerzy)

W ostatnich latach zaobserwowano znaczny wzrost zainteresowania zastosowaniem tuszów na bazie nanocząstek (NPs) metali do produkcji ścieżek przewodzących do tzw. „elastycznej” drukowanej elektroniki. Proces wytwarzania tego rodzaju nanomateriałów obejmuje z reguły dwa etapy: ich osadzanie lub drukowanie na odpowiednim podłożu a następnie spiekanie w celu przekształcenia nieprzewodzącego tuszu w metaliczne, przewodzące struktury. Dotychczas najczęściej wykorzystywaną metodą otrzymywania tego typu struktur było spiekanie termiczne prowadzone z reguły w wysokich temperaturach. W celu uniknięcia destrukcji wrażliwych na wysoką temperaturę podłoży wykorzystywanych w procesie wytwarzania przewodzących elastycznych obwodów i urządzeń poszukiwane są alternatywne metody spiekania umożliwiające obniżenie temperatury. Dotychczas do wytwarzania nanomateriałów przewodzących najczęściej wykorzystywane były nanocząstki srebra, jednakże ze względu na ich wysoki koszt oraz ograniczone właściwości mechaniczne poszukuje się innych komponentów. Jednym z kandydatów jest nikiel, który posiada zarówno dobre właściwości przewodzące jak i mechaniczne a ponadto jest metalem znacznie tańszym. Problemem jest niestabilność jego nanocząstek odnośnie procesu utleniania. W związku z czym zaproponowano pokrycie niklowego rdzenia (Ni NPs) srebrną powłoką ochronną zapewniającą dobrą odporność przeciw jego utlenianiu, tworząc struktury typu core-shell (Ni-Ag NPs).

Prace przeprowadzone w roku 2023 koncentrowały się na opracowaniu nowych metodologii wytwarzania drukowanych powłok przewodzących na bazie Ni-Ag NPs poprzez zastosowanie procesu spiekania w niskiej temperaturze. W związku z tym zbadano zarówno wpływ długości fali jak i czasu naświetlania promieniowaniem UV-Vis na ich właściwości przewodzące. Otrzymane wyniki sugerują, iż metoda UV-Vis jest odpowiednia do procesu otrzymywania przewodzących powłok na bazie Ni-Ag NPs. Najniższą wartość rezystywności $\sim 24 \mu\Omega \cdot \text{cm}$ uzyskano po 90 minutach naświetlania przy długości fali 350-400 nm (rys. 1). Obliczona przewodność takich powłok odpowiada 29-30% przewodności niklu w masie. Uzyskane wyniki przyczynią się do znaczącego postępu oraz rozwoju w dziedzinie nanotechnologii poprzez opracowanie nowej metodologii wytwarzania drukowanych materiałów przewodzących na elastycznych podłożach. Ponadto w przeprowadzonych badaniach wykorzystano niewymagające dużych nakładów finansowych tusze, co może być istotne z ekonomicznego i przemysłowego punktu widzenia. Mogą one obniżyć koszty procesu produkcji układów oraz urządzeń elektronicznych.



Rys. 1. Zależność rezystywności powłok na bazie Ni-Ag NPs od długości fali promieniowania UV-Vis.

3. Nanohybrydowe układy zawierające tlenek grafenu oraz nanocząstki jako funkcjonalne komponenty dla nowego typu biosensorów

Projekt badawczy "SONATA" NCN 2022/47/D/ST5/01751 [2023-2026]

(kierownik projektu: dr Tomasz Kruk)

Celem projektu jest opracowanie powtarzalnej metody tworzenia immunosensorów SPR z tlenkiem grafenu (GO) oraz hybrydami tlenku grafenu z polimerami i nanocząstkami metalicznymi. Tlenek grafenu lub jego modyfikowane postacie stanowiąc mają warstwę nośną, osadzoną na złotej powierzchni sensora. Właściwości optyczne i elektryczne tlenku grafenu wydają się być dobrym wzmocnieniem dla sygnału SPR, podnoszącym znacznie jego czułość. Ponadto duża powierzchnia adsorpcyjna GO oraz obecność grup funkcyjnych (grupy epoksydowe, karboksylowe, hydroksylowe) umożliwiają zarówno kowalencyjne jak i niekowalencyjne unieruchamianie białek na jego powierzchni. Modyfikacja tlenku grafenu popularnymi polimerami takimi jak np.: poli-L-lizyna, poli-L-arginina czy glikol polietylenowy zwiększy jego biokompatybilność i obniży cytotoksyczność. Ponadto dodatek nanocząstek będzie stanowił dodatkowe wzmocnienie sygnału powierzchniowego rezonansu plazmonowego. Funkcjonalność i czułość wytworzonych immunosensorów zostanie wyznaczona w trakcie szeregu analiz oddziaływań przeciwciał z antygenami.

Głównym celem badań w omawianym okresie (09-12.2023) było nałożenie warstwy (lub warstw) GO na powierzchnię złota w powtarzalny sposób. Przeprowadzono również charakterystykę fizykochemiczną zawiesiny GO obejmującą określenie wielkości, wartości potencjału zeta oraz obecnych grup funkcyjnych. Jako modelowe powierzchnie do osadzania tlenku grafenu wykorzystano kryształki QCM, których powierzchnia pokryta jest złotem i złota folia o grubości ~30 nm nałożona na szkiełka SPR. Nanoszona warstwa (lub warstwy) GO powinny charakteryzować się dużym pokryciem powierzchni, dużą stabilnością oraz homogenicznością. Należy również kontrolować liczbę warstw GO. Zastosowano kilka metod osadzania GO na powierzchni złota, m.in. z wykorzystaniem "spin coatera", "air brushing", metodę zanurzeniową oraz metodą adsorpcji GO na powierzchniach złota pokrytych tiolami. Obecnie prace mają na celu optymalizację osadzania GO w sposób kontrolowany i powtarzalny. Określone zostanie pokrycie powierzchni złota warstwą (lub warstwami) GO oraz jego grubość i jednorodność.

Projekty badawcze NCN „Opus”

1. Nowe biomateriały zawierające polisacharydy jako efektywna platforma do adsorpcji i uwalniania czynników wzrostu fibroblastów: zastosowania w diagnostyce i w leczeniu chorób cywilizacyjnych

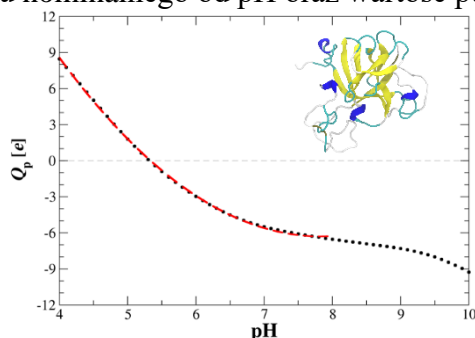
Projekt badawczy "OPUS" NCN 2018/31/B/ST8/03277 [2019-2023]

(kierownik projektu: dr hab. Aneta Michna)

Głównym celem realizowanego projektu stało się opracowanie efektywnej metody tworzenia stabilnych filmów polielektrolitowych umożliwiających kontrolowane przyłączenie i uwalnianie czynników wzrostu fibroblastów, co może znaleźć zastosowanie w leczeniu chorób cywilizacyjnych.

W minionym roku dokonano charakterystyki fizykochemicznej zmodyfikowanego chitozanu (MCHIT) za pomocą modelowania dynamiką molekularną (MD) oraz różnych technik eksperymentalnych. Przeprowadzone badania miały na celu określenie właściwości fizykochemicznych filmów polielektrolitowych tworzonych na bazie MCHIT oraz karagenu (K). Wyznaczono długość konturową molekuly MCHIT i średnicę równoważną łańcucha. Energie oddziaływań między łańcuchami MCHIT a K, wykazały, że w procesie tworzenia wielowarstw preferowana jest orientacja równoległa łańcuchów MCHIT- K w porównaniu z orientacją krzyżową. Wykazano, że molekuly MCHIT posiadają wysoki dodatni ładunek elektrokinetyczny w szerokim zakresie pH (do pH 10), co zapewnia dużą stabilność roztworów polisacharydu. Potwierdzono, że film polielektrolitowy zakończony warstwą K jest znacznie bardziej stabilny niż film zakończony MCHIT, co zostało ilościowo zinterpretowane w kontekście podejścia jonowego. Warto podkreślić, że uzyskane wyniki mają znaczenie praktyczne ponieważ umożliwiają opracowanie efektywnych procedur tworzenia biokompatybilnych filmów polielektrolitowych, co może znaleźć zastosowanie jako platforma do immobilizacji białek, w procesach tworzenia kapsuł w różnych systemach dostarczania leków i opakowaniach żywności o własnościach antybakteryjnych.

W kolejnym etapie badań MD oraz zaawansowane techniki badawcze tj. wielokątowe dynamiczne rozpraszanie światła, potencjał przepływu, optyczna spektroskopia światłowodowa mikrowąga kwarcowa i mikroskopia sił atomowych, zostały zastosowane do określenia podstawowych parametrów fizykochemicznych czynnika wzrostu fibroblastów 21 (CWF21). Po raz pierwszy określono podstawowe parametry fizykochemiczne białka tj. kształt molekuly, pole przekroju, zależność ładunku nominalnego od pH oraz wartość punktu izoelektrycznego - IEP 5,3.



Rys. 1 Ładunek nominalny (Q_p) molekuly CWF21 od pH obliczony przy zastosowaniu algorytmu PROPKA 3.0 (krzywa kropkowana). Przerywana czerwona linia- ładunek obliczony z funkcji dopasowania wielomianu. W prawym górnym rogu- struktura CWF21 uzyskana z obliczeń MD.

Wykazano, że CWF21 adsorbuje się nieodwracalnie na warstwie polikationu (poli(chlorek diallilodimetyloamoniowy), tworząc warstwy o kontrolowanym pokryciu do $0,8 \text{ mg m}^{-2}$, podczas gdy jego adsorpcja na krzemionce jest mniej efektywna. Określono przeżywalność dwóch linii komórkowych, CHO-K1 i L-929, zarówno na niepokrytych, jak i na pokrytych biwarstwą polikation/CWF21 podłożach. Udowodniono, że CWF21 nie jest toksyczny dla żadnej z badanych linii komórkowych. Uzyskane wyniki mogą służyć jako użyteczne systemy referencyjne do projektowania kompleksów, które mogą wydłużyć okres półtrwania białka w jego aktywnej postaci.

2. Nowe kompozyty smektytów z nanocząstkami TiO₂ otrzymanymi metodą odwróconej mikroemulsji do zastosowań fotokatalitycznych

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr-2018/31/B/ST5/03292 [2019-2024]

(kierownik projektu: prof. Ewa Serwicka-Bahranowska)

Nanocząstki TiO₂ wykorzystywane do syntezy kompozytów TiO₂/smektyt były otrzymywane przy pomocy metody odwróconej mikroemulsji. Odwrócona mikroemulsja to termodynamicznie stabilna i transparentna dyspersja wodnych mikrokropli w ciągłej fazie olejowej, stabilizowana obecnością cząsteczek surfaktantów na granicy faz woda/olej. Jako składnik smektytowy zastosowano montmorillonit (Mt), spreparowany na trzy sposoby: jako organiczna pochodna Mt, zawierająca w obszarze międzywarstwowym kationy cetylotrimetyloamoniowe (CTA-Mt), jako sodowa forma montmorillonitu (Na-Mt) oraz jako forma wodorowa montmorillonitu, otrzymywana przez aktywowanie Mt kwasem solnym (H-Mt). W okresie sprawozdawczym skoncentrowano się na optymalizacji właściwości fotokatalitycznych nanocząstek TiO₂. Stwierdzono, że są one bardzo silnie uzależnione od parametrów syntezy. W szczególności, przez modyfikację składu fazy wodnej mikroemulsji można otrzymać nanocząstki TiO₂ będące czystym fazowo anatazem albo rutyłem. Bardzo duże znaczenie dla kształtowania struktury nanocząstek TiO₂ ma także rodzaj prekursora (TiCl₄, Ti alkoxide), oraz medium stosowane do przemywania osadu (woda, woda/etanol, etanol). W rezultacie przeprowadzonych badań opracowano metodę syntezy nanocząstek TiO₂ o aktywności fotokatalitycznej, testowanej w rozkładzie rodaminu B, przewyższającej referencyjny fotokatalizator P25 (Fig. 1).

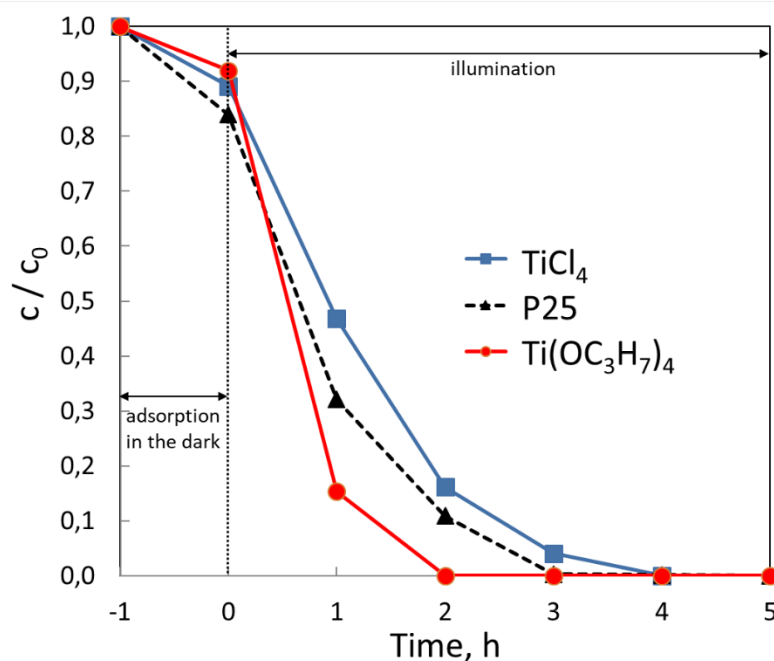


Fig. 1. Fotokatalityczny rozkład rodaminu B (10⁻⁵ M) na katalizatorach TiO₂ otrzymanych z różnych prekursorów (TiCl₄, Ti(OC₃H₇)₄) w porównaniu z fotoaktywnością TiO₂ referencyjnego (P25).

3. Gruboziarniste modelowanie węglowodanów

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2019/35/B/ST4/01149 [2020-2024]
(kierownik projektu: prof. dr hab. Wojciech Płaziński)

Parametryzacja pola siłowego MARTINI 3 dla hialuronianu, badanie właściwości konformacyjnych uronianów oraz analiza porównawcza pól siłowych pod kątem opisu wiązań glikozydowych

Opracowano model działający na poziomie rozdzielczości *coarse-grained* (CG) i służący do symulacji metodą dynamiki molekularnej hialuronianu oraz jego jednostek budulcowych (GlcNAc oraz GlcA). Opracowany model jest kompatybilny z polem siłowym MARTINI 3 oraz modelem CG wyprowadzonym uprzednio w ramach tego samego projektu i obejmującego sacharydy zbudowane z jednostek glukopiranozy. Model zwalidowano w oparciu o wyniki symulacji atomistycznych oraz dane strukturalne dot. kompleksów hialuronian-białko. Ponadto, wykonano i zanalizowano szereg symulacji badających oddziaływania między hialuronianem a membranami lipidowymi o różnym składzie.

W badaniach dotyczących konformacji monosacharydów uronianowych i prowadzonych na poziomie kwantowomechanicznym oraz klasycznych symulacji atomistycznych uzyskano szereg wyników dotyczących zarówno równowagi konformacyjnej pierścienia, wpływu obecności jonów metali na tą równowagę (szczególnie istotny w przypadku sulfonowanych pochodnych iduronianów) oraz dokładności równania Karplusa w kontekście stałych sprzężenia ${}^3J_{\text{HH}}$ dla wszystkich związków z grupy iduronianów. Badano również możliwość wykorzystania symulacji bazujących na hybrydowym potencjale (QM/MM) do badań równowag konformacyjnych w cząsteczkach monosacharydów.

W ramach niezależnej części projektu, rozpoczęto obliczenia oparte na trzech różnych, atomistycznych polach siłowych (CHARMM, GLYCAM oraz GROMOS) mające na celu porównanie ich przewidywań odnoszących się głównie do wiązania glikozydowego ale także w jaki sposób różnice w właściwościach konformacyjnych wiązań glikozydowych przekładają się na charakterystykę strukturalną oraz konformacyjną dłuższych łańcuchów. Badania obejmują 3 typy wiązań glikozydowych: $\beta(1-4)$, $\alpha(1-4)$ oraz $\beta(1-3)$. Do chwili obecnej skonstruowano szereg układów, przeprowadzono symulacje atomistyczne i wykonano podstawowe analizy.

4. Funkcjonalne warstwy i nanostruktury otrzymywane przy pomocy epitaksji z wiązek molekularnych wspomaganą zewnętrznymi czynnikami

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2020/39/B/ST5/01838 [2021-2024]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Józef Korecki)

W roku 2023 kontynuowano prace związane z rozwijaniem systemu nośników pozwalających na prowadzenie procesu MBE w warunkach UHV pod wpływem czynników zewnętrznych oraz na pomiary magnetyczne i elektryczne in situ. W szczególności udoskonalono nośniki do preparatyki w polu magnetycznym, poprawiając system chłodzenia magnezów, co pozwoliło na podniesienie temperatury preparatyki. Wykonano testowe pomiary oporu elektrycznego w funkcji grubości w trakcie wzrostu epitaksjalnych warstw Fe na MgO(001).

Wykazano istotny wpływ pola magnetycznego przyłożonego w trakcie wzrostu na właściwości magnetyczne ultra cienkich epitaksjalnych warstw magnetytu na podłożach MgO(111). Wykorzystując metody charakteryzacji in situ i ex situ, skaningową mikroskopię tunelową, spektroskopię Mössbauera elektronów konwersji i magnetoptyczny efekt Kerra (MOKE), pokazano, że pole magnetyczne przyłożone w płaszczyźnie podczas reaktywnego osadzania warstwy Fe₃O₄(111) o grubości 10 nm wpływa na morfologię wzrostu warstw magnetytu, co determinuje charakter procesu przemagnesowania zarówno w polu magnetycznym w płaszczyźnie jak i w polu prostopadłym. Zaobserwowane efekty wyjaśniono poprzez modyfikację efektywnej anizotropii magnetycznej.

Badano również wpływ pola magnetycznego na wzrost i właściwości magnetyczne epitaksjalnych warstw Fe(001) osadzonych na MgO(001). W trakcie wzrostu i wygrzewania warstw przyłożone było w płaszczyźnie warstw pole magnetyczne o indukcji 100 mT. Podobnie jak w przypadku warstw magnetytu na MgO(111) pomiary za pomocą skaningowej mikroskopii tunelowej in situ wykazały, że pole magnetyczne ma silny wpływ na morfologię warstw, a w szczególności na strukturę stopni i tarasów powierzchniowych. Właściwości magnetyczne warstw zbadano ex situ za pomocą magnetometrii i mikroskopii MOKE. Pokazano, że to stosunkowo niewielkie pole magnetyczne przyłożone w płaszczyźnie warstwy podczas wzrostu ma widoczny wpływ na właściwości magnetyczne. Zaobserwowaną zależność kątową pętli MOKE i struktur domenowych przeanalizowano w oparciu o różne modele przemagnesowania. W szczególności stwierdzono, że przemagnesowanie zachodzi poprzez domeny 90° i istotnie różni się w przypadku warstw rosnących bez pola i w polu magnetycznym, w korelacji z obserwowaną morfologią warstw.

5. Teranostyczne nanonośniki nowej generacji dla detekcji, diagnostyki i neuroprotekcijnego leczenia niedokrwiennych uszkodzeń mózgu

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2020/39/B/NZ7/01913 [2021-2025]

(kierownik projektu: prof. dr. hab. Piotr Warszyński)

Udar niedokrwienny mózgu, czyli nagle zatrzymanie krążenia mózgowego krwi prowadzące do powstawania deficytów neurologicznych, jest jedną z najczęstszych przyczyn śmierci i/lub długotrwałej niepełnosprawności u ludzi. Zgodnie z raportami Światowej Organizacji Zdrowia (WHO) aż 15 milionów ludzi na świecie choruje każdego roku na udar. Co więcej, biorąc pod uwagę obecną pandemię, istnieje coraz więcej dowodów, że również u pacjentów dotkniętych COVID-19 mogą wystąpić koagulopatie z powikłaniami zakrzepowo-zatorowymi, w tym udar niedokrwienny mózgu. Głównym ograniczeniem obecnego leczenia urazów niedokrwiennych/ reperfuzyjnych jest nieskuteczne dostarczanie leków neuroprotekcyjnych, do dotkniętej chorobą części mózgu, przez barierę krew-mózg przepuszczalną tylko dla małych, lipofilowe cząsteczek. Dodatkowo, niektóre leki neuroprotekcyjne mogą oddziaływać na organizm powodując toksyczność obwodową i liczne działania niepożądane. Teranostyka jest nową dziedziną medycyny polegającą na połączeniu funkcji terapeutycznej i diagnostycznej w jednym preparacie. Teranostyczne nośniki leków są w stanie nie tylko dostarczać lek do pożądanego narządu, ale dostarczanie to może być jednocześnie monitorowane za pomocą technik obrazowania, w celu optymalizacji celowania i dawkowania. Nośniki takie łączą zdolność enkapsulacji leków lipofilowych z wysoką wydajnością, z możliwością ich wykrywania za pomocą technik obrazowania, tj. metoda rezonansu magnetycznego (MRI) lub tomografia komputerowa. Ponadto powinny transportować lek, do docelowego miejsca w organizmie, bez jego utraty i uwalniać go w miejscu działania bez wywierania efektu terapeutycznego.

Głównym celem projektu, w którym biorą udział zespoły z Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, Instytutu Farmakologii im. Jerzego Maja PAN, Instytutu Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN oraz Collegium Medicum UJ, jest opracowanie nowej strategii dostarczania substancji o działaniu neuroprotekcijnym przy pomocy nanonośników, będących w stanie przekroczyć barierę krew-mózg, nie wykazując negatywnego wpływu na jej normalne funkcjonowanie, a których obecność w danym obszarze mózgu może zostać pokazana przy użyciu MRI.

W 2023 roku skupiliśmy się na modyfikacji polielektrolitowych nanonośników o strukturze rdzeń@powłoka, zawierających wybrane substancje neuroprotekcyjne tj.: cyklosporynę A (CsA) i takrolimus (FK506). Jako metodę enkapsulacji zastosowano technikę sekwencyjnego osadzania polielektrolitów na biokompatybilnych rdzeniach nanoemulsyjnych lub polimerowych. Do wytworzenia wielowarstwowej powłoki użyto następujących polielektrolitów: poli(L-Lizyny) znaczonej gadolinem– PLL-Gd, jako środka kontrastowego do MRI oraz poli(L-Lizyny) znaczonej rodaminą PLL-Rod jako środka kontrastowego do obrazowania fluorescencyjnego. Rozmiar otrzymanych nanonośników znajdował się w przedziale od 80 do 150 nm. Oceniono wpływ opracowanych nanopreparatów na żywotność linii komórkowej SH-SY5Y.

Na kolejnych etapach projektu określona zostanie efektywność działania enkapsulowanych substancji oraz ich lokalizacja *ex-vivo*, z wykorzystaniem hodowli organotypowych hipokampa w deprywacji tlenowo-glukozowej (OGD). Eksperymenty *in vivo* określą biodystrybucję nanonośników i wydajność transportu do mózgu. W końcowej fazie projektu działanie nanonośników zawierających neuroprotektanty zostanie przetestowane w zwierzęcym modelu udaru niedokrwiennego mózgu (MCAO).

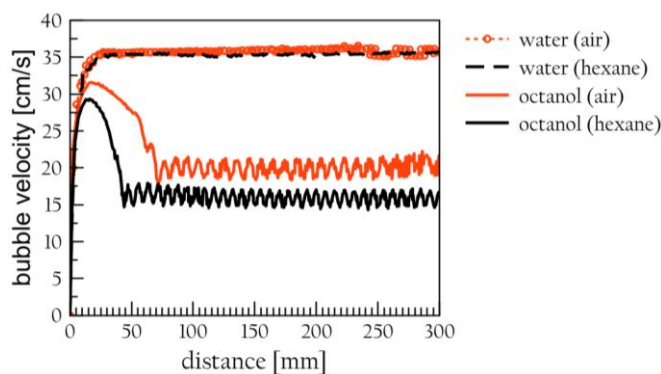
6. Opracowanie podstaw szybkiej i taniej fizykochemicznej metody detekcji zanieczyszczeń wody, opartej na monitorowaniu dynamicznych właściwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2021/43/B/ST8/00053 [2022-2025]
(kierownik projektu: dr hab. Jan Zawala, prof. IKiFP PAN)

Celem projektu są badania mające na celu stworzenie podstaw prostej fizykochemicznej metody detekcji zanieczyszczeń powierzchniowo-aktywnych wody, opartej na monitorowaniu zmian dynamicznych właściwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz. W praktyce, do określenia stężenia SPA w układach wodnych, użyte zostaną parametry ruchu pojedynczych unoszących się w cieczy pęcherzyków powietrza, z uwagi na fakt, że właściwości powierzchni ciecz/gaz w warunkach dynamicznych są niezwykle czułe na obecność nawet śladowych ilości substancji organicznych w roztworze (nawet rzędu ppm).

W okresie sprawozdawczym rozpoczęto prace mające na celu zaprojektowanie i konstrukcję prototypowego układu przeznaczonego do automatycznego pomiaru prędkości unoszącego się pęcherzyka w cieczy (roztworze wodnym). Wykonano prototyp takiego urządzenia, w skład którego wchodziła kapilara szklana o zdefiniowanej średnicy wewnętrznej, opracowany automatyczny generator pojedynczych pęcherzyków, kolumna szklana o przekroju kwadratowym oraz obudowa z wbudowanymi fototranzystorami, która została do tego celu specjalnie zaprojektowana oraz wykonana techniką druku 3D. Pierwszy prototyp pozwolił na pomiar prędkości granicznej pęcherzyka unoszącego się w czystej wodzie z zadawalającą dokładnością, potwierdzając tym samym, że zastosowana metodyka powinna być dalej rozwijana.

Ponadto, używając zmodernizowanego zestawu do pomiarów ruchu pęcherzyka metodą optyczną (szybka kamera, automatyczny podnośnik oraz skrypt analizujący zebrane obrazy), wykonano pomiary mające na celu określenie wpływu obecności par fazy organicznej na szybkość ustalania się dynamicznej warstwy adsorpcyjnej (DAL) na powierzchni pęcherzyka unoszącego się w roztworach surfaktantów. W tym celu pęcherzyk generowany był za pomocą strzykawki, wypełnionej w połowie heksanem. Powodowało to, że tworzący się w roztworze pęcherzyk wypełniony był parami heksanu, co zmieniało równowagę adsorpcyjną, prowadząc do znacznie szybszego ustalania się DAL na powierzchni pęcherzyka, w porównaniu z sytuacją, w której pęcherzyk wypełniony był tylko powietrzem. Ponadto, w czystej wodzie, nie stwierdzono wpływu par heksanu na hydrodynamiczne warunki brzegowe na powierzchni pęcherzyka, która pozostawała całkowicie ruchliwa, niezależnie od obecności par fazy organicznej. Przykładowe wyniki profili prędkości pęcherzyka unoszącego się w czystej wodzie oraz w roztworze n-oktanolu o stężeniu $1 \times 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$ w obecności i braku obecności par heksanu, przedstawiono na rys. 1.



Rys. 1. Profile prędkości pęcherzyka wypełnionego powietrzem lub mieszaniną powietrza i par heksanu, unoszonego się w czystej wodzie i roztworze n-oktanolu o stężeniu $1 \times 10^{-5} \text{ mol/dm}^3$.

7. Stany wzbudzone pod szkłem powiększającym -adaptacja metod opartych na analizie gęstości do badania molekularnych elektronowych stanów wzbudzonych

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2021/43/B/ST4/02969 [2022-2026]

lider: UW, IkiFP PAN partner

(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IkiFP PAN)

W ramach niniejszego projektu proponujemy systematyczne badanie stosowalności metod Chemicznej Topologii Kwantowej (ang. Quantum Chemical Topology, QCT), w szczególności ich rozszerzenie o nowe narzędzia, opracowane specjalnie dla stanów wzbudzonych różnego typu, takie jak stany walencyjne, wzbudzenia z przeniesieniem ładunku, wzbudzenia w obrębie rdzenia czy przejścia rydbergowskie.

W mijającym roku celem prowadzonych badań teoretycznych było porównanie deskryptorów otrzymanych dla tego samego stanu cząsteczki N-elektronowej obliczonych różnymi metodami. Wybrano następujące deskryptory: gęstość ładunku, Laplacian gęstości, funkcja lokalizacji elektronów (ELF), wskaźniki lokalizacji i delokalizacji. Geometrie cząsteczki formaldehydu, wybranej jako cząsteczka testowa, poddano optymalizacji w ramach teorii funkcjonałów gęstości (DFT) przy użyciu czterech funkcjonałów: CAM-B3LYP, M06-2x, TPSSh i ω B97x oraz metody sprzężonych klastrów ze wzbudzeniami pojedynczymi i podwójnymi (CCSD). Wzbudzone stany singletowe i trypletowe wyznaczono wykorzystując metodę równań ruchu w połączeniu z metodą sprzężonych klastrów ze wzbudzeniami pojedynczymi i podwójnymi (EOM-CCSD) oraz w ramach teorii funkcjonałów gęstości zależnej od czasu (TD-DFT). Do procesu optymalizacji geometrii i obliczeń stanów wzbudzonych wykorzystano bazy funkcyjne typu pVDZ, wykorzystując program Gaussian16. Generowanie plików wfx, potrzebnych do analizy gęstości elektronowej QAIM (Quantum Theory of Atoms in Molecules), przeprowadzono również przy użyciu programu Gaussian, zaś do właściwej analizy QAIM wykorzystano program AIMALL.

Scharakteryzowano następujące stany elektronowe formaldehydu: podstawowy stan singletowy S_0 , pierwszy wzbudzony stan singletowy S_1 oraz pierwszy wzbudzony stan trypletowy T_1 . Opisywane stany wzbudzone opisać można jako wynikające ze wzbudzenia elektronu zlokalizowanego na niewiążącej parze elektronowej grupy karbonylowej na antywiązący orbital π^* wiązania C=O. Proces ten osłabia i wydłuża wiązanie C=O w cząsteczce formaldehydu w stanie wzbudzonym (zarówno w S_1 jak i w T_1). Ponadto powoduje zmiany geometryczne w obrębie atomu węgla, które można opisać jako zmianę geometrii z płaskiej na tetraedryczną i towarzyszącą jej zmianę hybrydyzacji atomu C z sp^2 na sp^3 .

8. Struktura i Funkcja Korony Białkowej na Powierzchni Nanocząstek

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2021/41/B/ST5/02233 [2022-2026]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Barbara Jachimska, wykonawcy: dr Agnieszka Kamińska, mgr inż. Magdalena Szota)

Dendrymery poliamidoaminowe (PAMAM) ze względu na swoją strukturę i wysoki stopień monodispersyjności mogą stanowić obiecujący nanoonośnik do celowanego dostarczenia leków (DDS). Rozgałęziona budowa dendrymerów umożliwia tworzenia stabilnych kompleksów z ligandami poprzez enkapsulację w wewnętrznych przestrzeniach lub immobilizację na powierzchni struktury polimeru. Umiejscowienie cząsteczek leku ma istotny wpływ na kinetykę uwalniania substancji czynnej oraz mechanizm internalizacji nośnika do wnętrza komórki. W ramach prowadzonych badań zoptymalizowano warunki tworzenia efektywnych kompleksów dendrymeru G4.0 PAMAM z wybranymi lekami przeciwnowotworowymi: 5-fluorouracylem (5FU) oraz doksorubicyną (DOX). W badaniu monitorowano wpływ stopnia jonizacji cząsteczki dendrymeru G4.0 PAMAM oraz formy tautomerycznej leków przeciwnowotworowych na efektywność tworzenia kompleksu stosując spektroskopii UV-Vis oraz NMR. Obecność leków w nośniku powoduje zmiany potencjału zeta kompleksu w stosunku do układu wyjściowego. Zmiany te są wynikiem oddziaływania elektrostatycznego pomiędzy cząsteczkami leku i zewnętrznymi grupami funkcyjnymi nośnika. Stosując metodę DLS monitorowano stabilność kompleksów, ich wielkość oraz ewentualny stopień agregacji. Najkorzystniejsze warunki tworzenia kompleksu G4.0 PAMAM-5FU oraz G4.0 PAMAM-DOX, to niski stopień protonacji cząsteczki dendrymeru przy jednoczesnym występowaniu leku w postaci zdeprotonowanej (LCG4.0-5FU=18.0%, LCG4.0-DOX=39.2%).

Aktywność kompleksów w warunkach *in vitro* została wyznaczona stosując testy MTT. Testy wykazały brak toksyczności dendrymerów PAMAM oraz cytotoksyczność kompleksów względem komórek nowotworowych czerniaka (A375), raka jelita grubego (HT29), glejaka (SNB-19), raka prostaty (Du-145) i raka piersi (MCF). Ponadto zaobserwowano zwiększoną selektywność działania kompleksów w porównaniu do leków niezwiązanych z dendrymerem.

M. Szota, P. Wolski, C. Carucci, F.C. Marincola, J. Gurgul, T. Panczyk, A. Salis, B. Jachimska, Effect of Ionization Degree of Poly(amidoamine) Dendrimer and 5-Fluorouracil on the Efficiency of Complex Formation- A Theoretical and Experimental Approach. *Int. J. Mol. Sci.* 2023, 24, 81

M. Szota and B. Jachimska Effect of Alkaline Conditions on Forming an Effective G4.0 PAMAM Complex with Doxorubicin, *Pharmaceutics* 2023, 15(3), 875.

9. Nowa generacja surfaktantów wieloładunkowych o dedykowanej funkcjonalności

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- OPUS 2022/45/B/ST4/01184 [2023-2027]

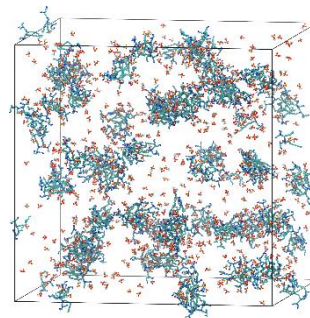
(kierownik projektu: prof. dr hab. Piotr Warszyński, projekt koordynowany przez prof. K.A. Wilk, Politechnika Wroclawska)

Głównym celem projektu, realizowanego przez konsorcjum dwóch grup badawczych (z Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN i Wydziału Chemicznego Politechniki Wrocławskiej, jest opracowanie podstaw naukowych nowatorskiej strategii projektowania i wytwarzania nowych wieloładunkowych środków powierzchniowo czynnych (surfaktantów) o dedykowanej funkcjonalności oraz ocena ich przydatności w wybranych zastosowaniach. W projekcie syntezowane są surfaktanty z różnymi grupami hydrofilowymi o strukturze dendrytycznej. Metody dynamiki molekularnej w połączeniu z podejściem opartym na termodynamicznych modelach adsorpcji wieloładunkowych surfaktantów umożliwiają wyjaśnienie mechanizmu niektórych zjawisk obserwowanych eksperymentalnie i stanowią podstawę do opracowania nowych materiałów przeznaczonych do poszczególnych zastosowania. Projekt łączy opis teoretyczny i weryfikację eksperymentalną wpływu takich parametrów, jak liczba i rodzaj grup hydrofilowych oraz długość łańcucha węglowodorowego na właściwości adsorpcyjne i agregacyjne nowo syntetyzowanych surfaktantów.

W roku 2023 przeprowadziliśmy pomiary izoterm napięcia powierzchniowego szeregu nowo syntezowanych surfaktantów, których struktury zobrazowane zostały w tabeli.

Nazwa surfaktantu	Struktura
Dibromek 2-dodecylo- <i>N,N,N,N',N',N'</i> -heksametylopropano-1,3-amoniowy	
Dibromek 2,2'-(dodecyloimino)bis(<i>N,N,N</i> -trimetyloetanoamoniowy)	
Tetrabromek <i>N,N</i> -etano-1,2-diylbis(<i>N</i> -dodecyloetano-1,2-bis(<i>N</i> -(3- <i>N,N,N</i> -trimetyloamoniowy)etano-1,2-diamno)-diaminy)	
Tetrametylosiarczan <i>N,N</i> -etano-1,2-diylbis(<i>N</i> -dodecylopropano-1,3-bis(<i>N</i> -(3-aminopropyl)propano-1,3-diamno)-diaminy)	

Przeprowadzono również symulacje agregacji wykorzystując program GROMACS ver. 2022.3. z polem siłowym CHARMM36 i modelem wody OPC4. Przykładowy snapshot uzyskany w trakcie symulacji przedstawia rysunek. Widoczne są struktury agregacyjne surfaktantu tetrametylosiarczanu *N,N*-etano-1,2-diylbis(*N*-dodecylopropano-1,3-bis(*N*-(3-aminopropyl)propano-1,3-diamno)-diaminy).



10. Mechanizmy cyklizacji związków czynnych biologicznie katalizowane przez enzymy zależne od żelaza

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2022/45/B/ST4/01411 [2023-2027]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Tomasz Borowski)

Prace eksperymentalne skupiały się na trzech homologach dioksygenaz ekstradiolowych L-DOPY (ang. L-DOPA 4,5-dioxygenase, DODA): *Escherichia coli*, *Portulaca grandiflora*, *Beta vulgaris*. Celem badań było otrzymanie metodą krystalografii rentgenowskiej struktur enzymów DODA w formie apoenzymu (jeśli taka struktura nie została jeszcze uzyskana, jak w przypadku *P. grandiflora*) lub w kompleksie z wybranymi ligandami (*E. coli*, *B. vulgaris*). Badano następujące katechole i analogi katecholi: L-DOPA, epikatechina, epigallokatechina, kwercetyna, dopamina, norepinefryna, 4-nitrokatechol, mimosyna. Udało się otrzymać dane odpowiadające kompleksom *BvDODA-Ni²⁺-4-nitrokatechol*, *BvDODA-Ni²⁺-mimosyna*, *tEcDODA-Ni²⁺-4-nitrokatechol* (w przypadku ostatniego otrzymano lepszą jakość danych niż poprzednio). Celem zwiększenia wydajności produkcji enzymów DODA z *P. grandiflora* oraz *B. vulgaris* testowano nową strategię oczyszczania (jedną ze zmian w protokole było zastosowanie homogenizacji), co faktycznie pozwoliło uzyskać więcej miligramów białka / 1 L pożywki.

W przypadku enzymu syntaza ektoiny z *Sphingopyxis alaskensis* przygotowano próbki na pomiary metodą Mossbauera (*SaEctC* z ⁵⁷Fe), których celem było lepsze zrozumienie aranżacji centrum aktywnego i walidacja wyników obliczeniowych. Dodatkowo, kontynuowano próby uzyskania struktury *SaEctC* ze związanymi jonem metalu (Fe lub analogami, jak np. Co) oraz substratem.

Prace obliczeniowe miały na celu poznanie prawdopodobnego mechanizmu reakcji katalizowanej przez *EctC*. Wyniki obliczeń QM/MM oraz pomiarów Mossbauera sugerują, że jon Fe^{2+} związany w miejscu aktywnym koordynowany jest przez 6 ligandów i występuje w stanie wysokospinowym (kwintet). Wyznaczone profile energii swobodnej wzdłuż ścieżki reakcji ujawniły, iż etapem limitującym szybkość procesu jest atak nukleofilowy grupy aminowej na węgiel karbonylowy substratu. Jon żelaza pełni kilka funkcji katalitycznych: aktywuje grupę karbonylową substratu, wiąże grupę OH, która jest akceptorem protonu na etapie tworzenia wiązania C-N, wiąże grupę tyrozynową, która dostarcza protonu do atomu tlenu z substratu. Ten ostatni jest następnie eliminowany z prekursora ektoiny jako grupa OH, która wiązana jest przez jon żelaza.

11. Biodegradowalne, biokompatybilne i interaktywne surfaktanty - jako ekologicznie bezpieczna alternatywa dla syntetycznych związków w procesach wytwarzania pian i emulsji do zastosowań kosmetycznych, medycznych i przemysłowych

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2022/45/B/ST8/02058 [2023-2027]

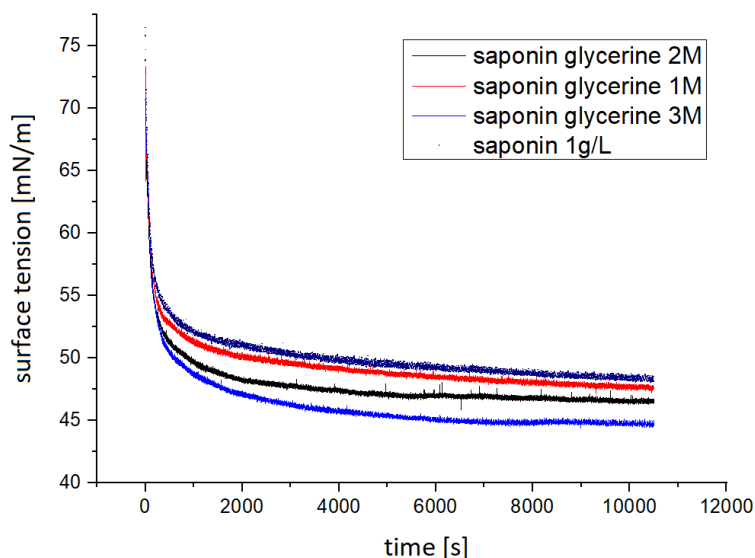
(kierownik projektu: dr Marcel Krzan)

W trakcie projektu chcę rozwiązać podstawowy problem badawczy dotyczący wpływu procesów adsorpcji na parametry fazowe układu dyspersyjnego oraz opracować nowe, bezpieczne piany/emulsje o doskonałej biokompatybilności i biodegradowalności wraz z technologiami ich wytwarzania w celu zmniejszenia negatywnego wpływu tradycyjnych chemicznych surfaktantów.

Aby osiągnąć te cele, muszę wyjaśnić wpływ struktury molekularnej i efektów dynamicznej adsorpcji środków powierzchniowo czynnych na różnych poziomach hierarchicznych wodnej pianki i emulsji funkcjonalizowanej od skali nano do makroskopowej. Dlatego w pierwszym roku realizacji projektu przeprowadziłem serię testów z wykorzystaniem bezpiecznego modelowego związku powierzchniowo czynnego (saponiny), który oddziałuje ze związkami będącymi donorami lub akceptorami wiązań wodorowych.

Stwierdzono, że np. dodatek mocznika, który może być zarówno donorem, jak i akceptorem wiązań wodorowych, zmniejsza aktywność powierzchniową roztworów saponin. Natomiast dodatek choliny, akceptora wiązań wodorowych, wpłynął na poprawę właściwości aktywności powierzchniowej badanych roztworów saponin. To samo dotyczy gliceryny, jednak i w tym przypadku należy również uwzględnić wpływ związku na lepkość roztworu.

W pracy wykonano serię pomiarów mieszanin wszystkich badanych związków, saponiny, mocznika, choliny i gliceryny, w celu zbadania wzajemnych oddziaływań chemicznych. Badania stabilności cienkowarstwowej (technika cienkiej warstwy ciekłej pod ciśnieniem), badania struktury pianki i reologii (lepkosprężystej) frakcji pianek planowane są na przyszły rok.



Rys. Zmiany napięcia powierzchniowego roztworów saponin i ich mieszanin z gliceryną.

12. Od pojedynczych molekuł do granulek stresowych – zrozumienie mechanizmów separacji faz białek związanych ze stwardnieniem zanikowym bocznym

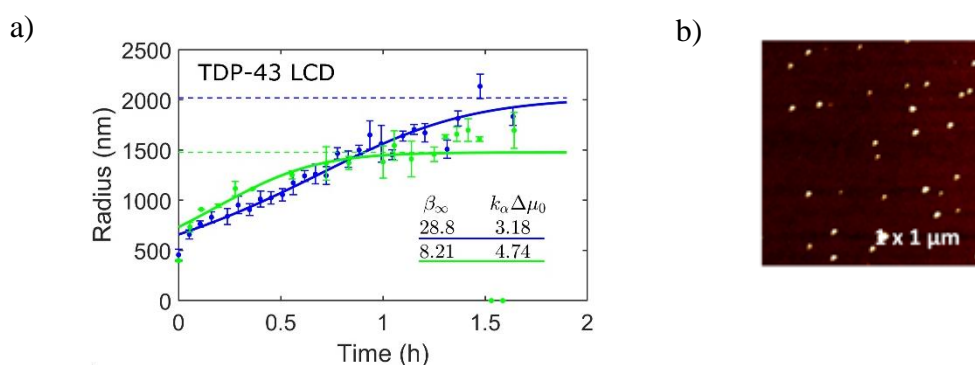
Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2021/43/B/ST8/01900 [2023-2027]

(kierownik projektu: dr hab. Anna Bratek-Skicki, wykonawcy: prof. Z. Adamczyk, dr P. Żeliszewska, dr A. Kluz)

Choroby neurodegeneracyjne dotykają blisko 50 milionów ludzi na całym świecie a liczba ta ciągle rośnie wraz z wydłużaniem się życia ludzi oraz wzrastającą liczbą czynników ryzyka. Charakteryzują się one postępującymi zmianami zwyrodnieniowymi komórek nerwowych, które z biegiem czasu ulegają większemu zniszczeniu i dysfunkcji. Jedną z takich chorób jest stwardnienie zanikowe boczne (ALS), które jest śmiertelną chorobą neuronów ruchowych. W komórkach nerwowych pacjentów znajduje się agregaty białek, których obecność łączy się z ich toksycznym oddziaływaniem na neurony. Powstają one często na skutek tworzenia granulek stresowych w wyniku procesu zwanego separacją faz, który w warunkach patologicznych prowadzi do powstania agregatów. Obecnie nie ma skutecznych leków ani terapii pozwalających na leczenie ALS.

Głównym celem projektu jest zrozumienie mechanizmów odpowiedzialnych za tworzenie granulek stresowych (kondensatów), (SG), oraz ich patologicznych przemian w kierunku tworzenia agregatów zbudowanych z białek związanych z ALS. W projekcie tym skupiono się głównie na białkach takich jak TDP-43, hnRNPA2, które występują u pacjentów z ALS, G3BP1, białko odpowiedzialne za inicjację tworzenia SG, FUS, wielofunkcyjne białko uczestniczące również w wielu szlakach metabolicznych. Zrozumienie tych procesów pozwoli to na kontrolowanie powstawania kondensatów, co w dłuższej perspektywie przyczynić się może do opracowania skutecznych terapii skierowanych przeciwko wspomnianemu schorzeniu.

W 2023 roku skupiono się na charakterystyce fizykochemicznej TDP-43 i hnRNPA2 w roztworze w różnych warunkach pH i siły jonowej oraz badaniu kinetyk separacji faz (Rys.1a). Zostały wykonane pomiary AFM w celu określenia rozkładu wielkości molekuł białka, a następnie ich adsorpcja na ujemnym lateksie w celu określenia ładunku oraz punktu izoelektrycznego. Wykazano, że TDP-43 i hnRNPA2 tworzą stabilne struktury oligomeryczne w buforach MES i CAPS przed incjacją separacji faz (Rys.1b). Ponadto, we współpracy z grupą z Uniwersytetu w Porto w Portugalii oraz grupą z Uniwersytetu w Brukseli (VUB) w Belgii opracowano model separacji faz białek uwzględniający rolę napięcia powierzchniowego podczas tworzenia się pierwszych zarodków kondensatów oraz ich dalszego wzrostu. Wykazano, że powstawanie ograniczonej liczby dużych kondensatów jest możliwe bez aktywnych mechanizmów kontroli wielkości i przy braku zjawisk koalescencji. Dokładne rozwiązania analityczne opracowanego modelu można zastosować do badań z udziałem potencjalnych leków i ich wpływu na poszczególne etapy separacji faz.



Rys. 1 Charakterystyka fizykochemiczna TDP-43 (kinetyka separacji faz z artykułu Z. Sárkány et al., Adv. Sci. 2023, 10, 2301501) i hnRNPA2 (białko w buforze CAPS): a) wzrost kondensatów utworzonych z TDP-43 w funkcji czasu mierzony za pomocą dynamicznego rozpraszania światła, b) struktury oligomeryczne hnRNPA2 zobrazowane za pomocą AFM.

13. Badania nad kooperacją jonów metali w dwuatomowych centrach złożonych z jonów metali przejściowych

Projekt badawczy „OPUS LAP” NCN nr- 2020/39/I/ST4/02559 [2021-2024]

(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN)

W ramach niniejszego projektu planowane jest zbadanie reaktywności dwuatomowych centrów złożonych z metali przejściowych (TMI = Fe, Co, Mn, Ni) wprowadzonych do matryc zeolitowych jako nieorganicznych analogów miejsc aktywnych występujących w enzymach. Ubiegłoroczne badania koncentrowały się na 1) określeniu reaktywności układów modelowych, w których jony metali przejściowych tworzą odległe centra dwujądrowe (odległość metal – metal ok. 7,5 Å), wobec aktywacji wiązania O-O w O₂ i utworzenia reaktywnych form tlenu odpowiedzialnych za selektywne utlenianie w układach modelowych; 2) optymalizacja warunków testów katalitycznych w procesie utleniającego odwodornienia propanu dla materiałów na bazie zeolitów, do których wprowadzono jony metali przejściowych jako izolowane, pojedyncze kationy, albo jako centra dwujądrowe.

1) Do badań procesu aktywacji O₂ przez dwa odległe, współdziałające jony Fe(II) wykorzystano model składający się z dwóch porfiryn żelaza(II), które umieszczono równolegle względem siebie w odległości 7,5 Å. Cząsteczkę tlenu umieszczono pomiędzy dwoma jonami żelaza(II), równolegle do osi łączącej obydwie centra metaliczne. Atomy wodoru obu porfiryn pozostały zamrożone, podczas gdy pozostałe atomy w cząsteczkach miały swobodę ruchu podczas prowadzonych optymalizacji. Jako współrzędną reakcji wybrano odległość O-O, a następnie przeprowadzono skanowanie energii potencjalnej i optymalizację uzyskanego stanu przejściowego odpowiadającego rozerwaniu wiązania O-O. Obliczenia wykonano w ramach Teorii Funkcjonałów Gęstości przy użyciu oprogramowania Turbomole v6.3. Do obliczeń użyto baz funkcyjnych typu def2-TZVP oraz funkcyjnału Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Do obliczenia elektronowych oddziaływań kulombowskich zastosowano metodę resolution of identity (RI), znaną również jako dopasowanie gęstości. W stanie przejściowym wiązanie O-O w cząsteczce tlenu ulega wydłużeniu z 1,21 Å (długość wiązania w izolowanej cząsteczce O₂) do 1,57 Å. Oba jony żelaza wiążą atomy tlenu (długość wiązań Fe-O równa jest 1,94 Å i 1,95 Å). Procesowi temu towarzyszy znaczne wyciągnięcie jonów żelaza poza płaszczyznę pierścieni tetrapirołowych, któremu towarzyszy ich deformacja. Następnie w reakcji powstają dwie oksoporfiryny żelaza. Bariera energetyczna badanego procesu rozszczepienia cząsteczki tlenu wynosi 38 kcal/mol. W obu okso-żelazo porfirynach stwierdzono taką samą odległość pomiędzy żelazem i tlenem (długości wiązań Fe=O równej 1,625 Å). Odległość pomiędzy atomami tlenu wynosi 3,80 Å. Wykonane obliczenia pokazują zdolność odległych dwucentrowych centrów żelazowych do aktywacji i rozszczepienia cząsteczki tlenu poprzez niezależnie od charakteru „matrycy” (glinokrzemian, pierścień organiczny) zastosowanej do stabilizacji jonów Fe(II) przy zapewnieniu odpowiedniej odległości i geometrycznej orientacji jonów Fe(II).

2) Reakcję katalityczną (utleniające odwodornienie propanu) prowadzono w reaktorze przepływowym ze złożem stałym z chromatografem gazowym w celu wykrycia substratów i produktów reakcji w zakresie temperatur od 200-500 °C, przy zmiennym czasie kontaktu. Zoptymalizowano warunki reakcji i przeprowadzono wstępne testy badanych układów.

14.Strategie prewencji konserwatorskiej dla obiektów z poli(chlorku winylu)

Projekt badawczy „OPUS LAP” NCN nr 2020/39/I/HS2/00911 [2022-2025]

(kierownik projektu: *prof. dr hab. Łukasz Bratasz*, wykonawcy: *dr inż. Sonia Bujok*,
dr Sergii Antropov)

Celem projektu jest opracowanie strategii prewencji konserwatorskiej, która określi najdogodniejsze warunki przechowywania obiektów dziedzictwa kultury wykonanych ze zmiękzonego poli(chlorku winylu) - PVC, mając na uwadze względy ekonomiczne i ekologiczne. Badania prowadzone w ramach tego projektu skupiają się przede wszystkim na śledzeniu procesu degradacji w łagodnych warunkach (dla temperatury nieprzekraczającej 80 °C) poprzez obserwowanie zmian chemicznych zachodzących w PVC i ich skorelowanie ze zmianami we właściwościach mechanicznych materiału.

W drugim roku trwania projektu zakończono badania dotyczące migracji plastyfikatorów, dzięki którym wyznaczono współczynniki dyfuzji oraz emisji powierzchniowej najczęściej występującego plastyfikatora w obiektach dziedzictwa, tj. DEHP (ftalanu bis(2-etyloheksylu)), a także zaproponowano funkcję opisującą ucieczkę DEHP z obiektów w czasie w zależności od początkowej zawartości plastyfikatora, temperatury oraz grubości obiektu. Na tej podstawie określono najbardziej zagrożone obiekty w kolekcjach PVC w postaci cienkich folii lub obiektów pokrytych warstwą ze zmiękzonego PVC. Ustalono, że prędkość przepływu powietrza (wentylacja) nie wpływa znacząco na szybkość ucieczki plastyfikatora. Wykazano również, że usuwanie warstwy plastyfikatora z powierzchni obiektu nie zmienia szybkości jego migracji, co pozwoliło stwierdzić, że czyszczenie obiektów ze zmiękzonego PVC jest bezpiecznym zabiegiem konserwatorskim. Model transportu plastyfikatora opracowany w oparciu o dane eksperymentalne oraz symulacje komputerowe został uzupełniony o przegląd i analizę zbiorów obiektów wykonanych z PVC. Ponadto, wykonano symulacje dyfuzji najmniejszej (najbardziej mobilnej) cząsteczki ftalanowego plastyfikatora, t.j. DBP (ftalanu dibutyli) we współpracy z prof. Tomaszem Pańczykiem, za pomocą dynamiki molekularnej, a także wyznaczono współczynnik dyfuzji DBP za pomocą dyfuzometrii NMR w ciele stałym we współpracy z Centrum NanoBioMedycznym UAM w Poznaniu.

Wspólnie z zespołem z Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego zaproponowano nieniszczącą metodę analizy jakościowej plastyfikatorów w obiektach dziedzictwa kultury w oparciu o analizę widm Ramana za pomocą uczenia maszynowego. Zakończono eksperymenty przyspieszonego starzenia sztywnego (nieplastyfikowanego) oraz zmiękzonego PVC w 60 i 80 °C, a następnie przeprowadzono szereg analiz w celu skorelowania zmian chemicznych (spektroskopia Ramana, w podczerwieni, UV-Vis, elektronowego rezonansu paramagnetycznego; fluorescencja rentgenowska, rentgenowska spektrometria fotoelektronów, skaningowa mikroskopia elektronowa ze spektroskopią dyspersji energii, pomiar kąta zwilżania, chromatografia żelowa) ze zmianami we właściwościach mechanicznych (statyczna próba rozciągania, dynamiczna analiza mechaniczna).

Rozpoczęto budowę modelu mechanicznego w oprogramowaniu COMSOL Multiphysics® dla reprezentatywnego dla zbiorów obiektu dmuchanego wykonanego ze zmiękzonego PVC w oparciu o parametry materiałowe wyznaczone dla różnych rodzajów PVC w testach statycznych i dynamicznych, które umożliwiają przewidywanie długofalowych właściwości mechanicznych materiału. Model posłuży do oceny ryzyka powstawania uszkodzeń mechanicznych (deformacji oraz spękań) w obiektach dziedzictwa z PVC.

Na podstawie przeprowadzonych eksperymentów oraz symulacji komputerowych zostaną zaproponowane wytyczne z zakresu prewencji konserwatorskiej dla obiektów sztuki współczesnej wykonanych lub zawierających elementy ze zmiękzonego PVC.

Projekty badawcze NCN „Sonatina”

1. Multifunkcjonalne kompozytowe powłoki chitozanowe dla biodegradowalnych stopów Mg

Projekt badawczy „SONATINA” NCN nr- 2021/40/C/ST5/00266 [2021-2024]
(kierownik projektu: dr Dżmitry Charytonau)

Stopy magnezu są obiecującymi materiałami dla zastosowań w materiałach biodegradowalnych. Pomimo znacznych zalet, takich jak biokompatybilność i nietoksyczność stopów Mg i produktów ich degradacji, mają one kilka wad. Główną wadą takich materiałów jest ich szybka degradacja w środowisku wodnym. Z tego powodu należy opracować nowe sposoby modyfikacji powierzchni umożliwiające kontrolę procesu degradacji stopów Mg. Chitozan jest naturalnym polimerem, który doskonale nadaje się do zastosowań biomedycznych ze względu na swoją nietoksyczność, biokompatybilność, biodegradowalność, zdolność do tworzenia warstw, właściwości mechaniczne i niski koszt.

Ogólnym celem projektu jest opracowanie, na bazie chitozanu, nowego typu wielofunkcyjnych powłok na powierzchni stopów magnezu o zwiększonej odporności na korozję i działaniu antybakteryjnym.

W okresie sprawozdawczym wykonywano drugie i trzecie zadanie projektu:

Zadanie 2. Wytwarzanie i charakterystyka powłok kompozytowych na bazie chitozanu na powierzchni stopów Mg.

Do badań zostały wybrane trzy rodzaje chitozanu o wysokiej, średniej i niskiej masie cząsteczkowej. Jako cząstki drugiej fazy wybrano ZnO, hydroksyapatyt i nanorurki haloizytu. Do koordynacyjnego osadzania wybrano jony fosforanowe i molibdenianowe. Otrzymane powłoki scharakteryzowano za pomocą analizy dyfrakcji promieni rentgenowskich (XRD), skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), spektroskopii w podczerwieni FT i spektroskopii Ramana. Jako podłoża zastosowano stopy Mg: AZ31 (Mg-Al-Mn) i WE43 (Mg-Y-Nd-Zr). Na podstawie uzyskanych wyników wybrano obiecujące powłoki do dalszych badań.

Zadanie 3. Analiza właściwości mechanicznych powłok.

W ramach Zadania 3 rozpocząłem staż międzynarodowy pod kierunkiem prof. Nilsa Almqvista w grupie Experimental Physics, katedra Materials Science, Wydział Engineering Sciences and Mathematics, Luleå University of Technology (Szwecja). W ramach stażu za pomocą klasycznej mikroskopii sił atomowych (AFM) i intermodulacyjnej mikroskopii sił atomowych (ImAFM) badane są właściwości nanomechaniczne powłok chitozanowych wybranych w zadaniach 1 i 2. Obecnie badana jest topografia, właściwości nanomechaniczne i odporność powłok na zużycie.

Dodatkowo przeprowadzono szczegółowe badania właściwości korozyjnych stopów AZ31 i WE43 w roztworze Hanka. Zaproponowano narzędzie oparte na wieloczęstotliwościowej metodzie pomiaru impedancji do monitorowania niestacjonarnych procesów elektrochemicznych, w połączeniu z analizą rozkładu czasów relaksacji (DRT), w celu zbadania mechanizmów korozji tych stopów.

Aby porównać działanie powłok chitozanowych z innymi powłokami biodegradowalnymi, na powierzchni stopu WE43 Mg osadzono serię powłok z kwasu polimlekowego (PLA) i fosforanów. Zbadano ich mikrostrukturę, skład fazowy oraz właściwości przeciwkorozyjne w roztworze Hanka.

Projekty badawcze NCN „Preludium Bis”

1. Wpływ funkcjonalizacji powierzchni nanocząstek metali i tlenków metali polifenolami niskocząsteczkowymi na ich aktywność w procesach fibrylizacji białek

Projekt badawczy „PRELUDIUM BIS” NCN 2022/47/O/ST5/1858 [2023-2027]

(kierownik projektu: dr hab. Magdalena Oćwieja, prof. IKiFP)

Choroby neurodegeneracyjne są chorobami nieuleczalnymi, dlatego też wciąż znajdują się w centrum zainteresowania badaczy, którzy poszukują metod ich zapobiegania. Wiele danych literaturowych dowodzi, że niepożądana agregacja białek do włókien (fibryli), wynikająca z wadliwego fałdowania białek jest związana z etiologią chorób neurodegeneracyjnych. Udowodniono, że niektóre nanocząstki metali i tlenków metali, będące nanometrycznymi strukturami o rozmiarach mniejszych niż 100 nm, posiadają aktywność w procesach fibrylizacji białek. Aktywność nanocząstek w procesach fibrylizacji białek zależy od ich właściwości fizykochemicznych, a przede wszystkim struktury chemicznej warstwy stabilizującej. Celem proponowanego projektu jest opracowanie wydajnych metod funkcjonalizacji nanocząstek metali (Ag, Pt) i tlenków metali (TiO_2 , Fe_3O_4 , ZnO) polifenolami niskocząsteczkowymi o udokumentowanych właściwościach antyfibrylarnych. Kwas galusowy (GA) i kwas rozmarynowy (RA) należą do niskocząsteczkowych polifenoli o dobrze udokumentowanej aktywności w procesach fibrylizacji. Ponadto, oba polifenole są przeciwutleniaczami o właściwościach przeciwbakteryjnych i przeciwwirusowych. Niektóre doniesienia literaturowe wykazały, że te polifenole są zdolne do hamowania rozwoju raka. Stawiana hipoteza zakłada, że nanocząstki metali i tlenków metali sfunkcjonalizowane polifenolami o właściwościach anty-fibrylarnych, będą silniej hamować procesy fibrylizacji niż wolne nanocząstki i polifenole.

W pierwszym etapie badań uwagę skupiono na otrzymaniu nanocząstek srebra (AgNPs) stabilizowanych kwasem galusowym oraz rozmarynowym. Przeprowadzono szereg syntez, w których AgNPs otrzymywano metodą redukcji jonów srebra za pomocą borowodoru sodu w obecności kwasu galusowego lub rozmarynowego. W drugim podejściu, oba polifenole pełniły rolę zarówno reduktorów jak i stabilizatorów AgNPs. Otrzymane hydrozole AgNPs zostały poddane procesowi oczyszczania z nadmiaru nieprzereagowanych reagentów, a następnie scharakteryzowano ich właściwości fizykochemiczne. Na podstawie obrazowania mikroskopowego (SEM, TEM) ustalono, że niezależnie od zastosowanej procedury AgNPs charakteryzowały się quasi-sferycznym kształtem oraz wielkością w zakresie od 5 do 30 nm. Optymalizacja warunków syntezy wykazała, że zwiększając stężenie polifenoli i/lub pH mieszaniny reakcyjnej otrzymuje się nanocząstki o mniejszych rozmiarach. Na podstawie pomiarów spektrofotometrycznych ustalono, że niezależnie od zastosowanej procedury preparatyki, stabilizacja AgNPs jest wynikiem adsorpcji zastosowanych polifenoli na granicy międzyfazowej ciało stałe/ciecz. Pomiary przeprowadzone z zastosowaniem techniki dynamicznego i elektroforetycznego rozpraszania światła dowiodły, że wszystkie typy otrzymanych AgNPs ulegały agregacji w warunkach kwasowych ($\text{pH} < 3,5$) oraz sile jonowej wyższej od 10 mM. Zarówno AgNPs stabilizowane za pomocą kwasu galusowego jak i rozmarynowego charakteryzowały się ujemnym potencjałem zeta, którego wartość obniżała się wraz ze wzrostem pH. Żadne z otrzymanych nanocząstek nie posiadały punktu izoelektrycznego.

Projekty badawcze NCN „Preludium”

1. Wolframowa oksydoreduktaza aldehydu z *Aromatoleum aromaticum* – badania mechanizmu reakcji katalitycznej

Projekt badawczy "PRELUDIUM" NCN nr 2017/27/N/ST4/02676 [2018-2023]

(kierownik projektu: mgr inż. Agnieszka Winiarska,
opiekun grantu: prof. dr hab. Maciej Szaleniec)

Wolframowe enzymy oksydoreduktazy aldehydu (AOR) katalizują w obecności ferredoksyny odwracalną reakcję utlenienia aldehydów do odpowiednich kwasów karboksylowych, a z powodu szerokiego spektrum substratowego, przypisuje się im rolę w detoksykacji szkodliwych metabolitów aldehydowych w szlakach fermentacyjnej degradacji aminokwasów. Wolframowa oksydoreduktaza aldehydu z pochodząca z mezofilnej bakterii *Aromatoleum aromaticum* (AOR_{Aa}) została wybrana jako obiekt badań w projekcie ze względu na wyższą odporność na tlen i niższe optimum temperaturowe katalizowanych reakcji niż dotychczas scharakteryzowane AOR z hipertermofilnych archeonów (np. *Pyrococcus furiosus*) i bakterii.

Zaplanowane w projekcie badania miały na celu dostarczenie wiedzy o budowie centrum aktywnego enzymu i jego reaktywności, dzięki czemu możliwe będzie określenie mechanizmu reakcji katalizowanej przez AOR_{Aa}. Charakterystykę strukturalną AOR_{Aa} przeprowadzono za pomocą mikroskopii krioelektronowej i fotometrii masowej, która wykazała, że białko tworzy filament protomerów AorAB zakończony pojedynczą podjednostką AorC (Fig. 1). Podjednostka AorA oligomeryzuje do nanoprzewodu przewodzącego elektrony, łączącego aktywnie enzymatycznie podjednostki AorB zawierające kofaktor wolframowy (W-co). Szczegóły strukturalne dostarczone przez zrekonstruowaną mapę gęstości AOR_{Aa} o rozdzielczości 3,3 Å pokazały sposób wiązania kwasu benzoesowego w centrum aktywnym.

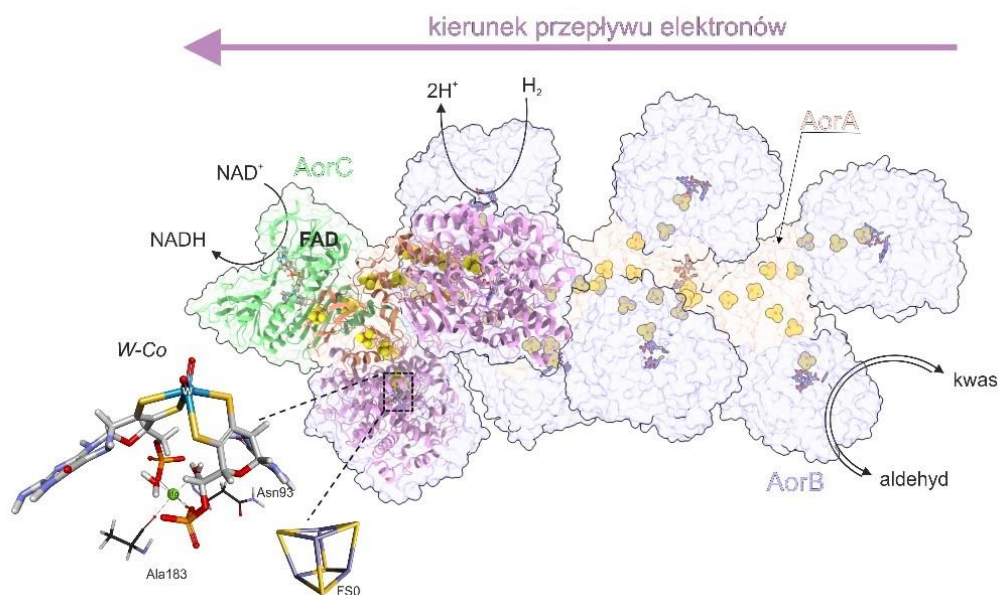


Fig. 1. Rekonstrukcja oligomerycznej struktury AOR_{Aa} na podstawie struktury z CryoEM, pomiarów fotometrii mas oraz obliczeń QM:MM.

Aby udowodnić, że C-końcowy fragment AorA odgrywa główną rolę w tworzeniu filamentu, skonstruowany został wariant białka Δ helix-AOR pozbawiony reszt AorA od 138 do C-końca. Następnie za pomocą fotometrii mas zaobserwowano jedynie kompleksy AorABC, potwierdzając hipotezę o kluczowej roli C-końcowej helisy w filamentacji enzymu.

2. Analiza wpływu wybranych czynników na zmiany struktury α -synukleiny

Projekt badawczy "PRELUDIUM" NCN nr 2020/37/N/ST4/02132 [2021-2024]

(kierownik projektu: mgr Paulina Tworek (Komorek),

opiekun projektu: prof. dr hab. inż. Barbara Jachimska)

Choroba Parkinsona to choroba neurodegeneracyjna, która dotyczy około 2% populacji po 60 roku życia. Charakteryzuje się głównie zaburzeniami narządu ruchu i objawia się głównie spowolnieniem ruchowym, drżeniem, sztywnością mięśni i utratą koordynacji. Cechą charakterystyczną choroby jest występowanie ciał Lewy'ego – nieprawidłowej agregacji białek, która rozwija się wewnątrz komórek nerwowych. Badania składu ciałek Levy'ego wykazały, że zawierają one głównie białko α -synukleinę, które występuje w nieprawidłowo sfałdowanych formach i może być przyczyną śmierci neuronów. W tym przypadku wiele wysiłku włożono w badania nad α -synukleiną. Wykazano, że zaburzenie oddziaływań dalekiego zasięgu pomiędzy regionami α -synukleiny mogą być przyczyną nieprawidłowego procesu fałdowania łańcucha polipeptydowego. Jednym z czynników, który może indukować te zmiany, są zjawiska zachodzące na granicy faz. Badania termodynamiczne i kinetyczne na granicy faz potwierdziły, że zmiany konformacyjne mogą pojawić się w momencie zetknięcia się cząsteczki białka z powierzchnią membrany biologicznej. Kolejnym czynnikiem mogącym zakłócić oddziaływanie pomiędzy regionami α -synukleiny jest zmiana rozkładu ładunku na jej powierzchni. Badania eksperymentalne potwierdzają, że nawet niewielka zmiana w rozkładzie ładunku na powierzchni białka jest indykatorem zmian w strukturze drugorzędowej α -synukleiny, prowadząc nawet do agregacji. Należy podkreślić, że dotychczasowe badania dotyczą głównie zachowania α -synukleiny w roztworze, znacznie mniej badań poświęconych jest oddziaływaniu tego białka z powierzchnią, co może mieć kluczowe znaczenie w procesie zmian zachodzących w zakresie struktury drugorzędowej.

Badania prowadzone w ramach projektu dotyczą wpływu oddziaływań molekularnych białek nieuporządkowanych z powierzchnią na strukturę drugorzędową białka i skuteczność osadzania białek na wybranej powierzchni modelowej o znanej gęstości ładunku powierzchniowego. Badania dają przyczynek do wyjaśnienia mechanizmu fałdowania α -synukleiny w kierunku tworzenia toksycznych agregatów i włókienek.

3. Opracowanie racjonalnych wytycznych środowiskowych na potrzeby krótko-trwałych wydarzeń religijnych, kulturalnych i komercyjnych w budynkach zabytkowych

Projekt badawczy "PRELUDIUM" NCN nr 2020/37/N/HS2/01727 [2021-2024]

(kierownik projektu: mgr inż. Magdalena Soboń,

opiekun projektu: prof. dr hab. Łukasz Bratasz)

W ramach projektu kontynuowano prace nad opracowaniem racjonalnych, opartych na wynikach badań, wytycznych dotyczących kontroli klimatu we wnętrzach zabytkowych, co pozwoli kustoszom i właścicielom podobnych budynków podejmować decyzje mające na celu ochronę pozostającego pod ich opieką dziedzictwa kultury, stanowiącego w głównej mierze przez masywne obiekty drewniane, tj. rzeźby i elementy dekoracyjne. Projekt ma na celu w szczególności określenie bezpiecznej strategii ogrzewania zabytkowych wnętrz na potrzeby krótkotrwałych wydarzeń religijnych, kulturalnych i komercyjnych.

Poddano analizie wyniki przeprowadzonych pomiarów własności mechanicznych drewna lipowego: modułów Younga w kierunku stycznym i radialnym, współczynników Poissona, krytycznej szybkości uwalniania energii oraz odkształcenia do zniszczenia. Wielkości te wyrażono w odniesieniu do zawartości wody w drewnie (MC) przeliczonej następnie na wilgotność względną (RH) poprzez równanie izotermy skaningowej. Na potrzeby modelowania, do uzyskanych danych dopasowano funkcje opisujące zmienność parametrów w pełnym zakresie RH (0-100%) ze względu na znaczącą roczną amplitudę RH we wnętrzach zabytkowych.

Dwuwymiarowy model masywnego drewnianego elementu, służący do analizy procesu propagacji pęknięć pod wpływem wahań klimatu, zaadaptowano do szacowania zagrożeń w budynkach historycznych Europy Centralnej poprzez aktualizację właściwości mechanicznych w modelu w oparciu o wielkości otrzymane eksperymentalnie. Następnie poddano ocenie prowadzone wcześniej wstępne symulacje numeryczne zmiany szybkości uwalniania energii (G) w wyniku nagłego spadku RH oraz w wyniku zmian cyklicznych w świetle uzyskanych nowych danych o własnościach drewna. W wyniku zmian cyklicznych, opisanych funkcją sinusoidalną, obserwowano wzrost poziomu RH odpowiadającego braku naprężeń w materiale w stosunku do pierwotnego poziomu, wokół którego oscylowała funkcja sinus.

Przeprowadzono również pełną symulację klimatu wnętrza budynku historycznego – Bazyliki Mariackiej w Krakowie – w oparciu o dane pomiarowe. W celu oceny zagrożenia, z jakim może wiązać się ta zmienność dla Ołtarza Wita Stwosza, modelowano rzeźbę lipową o średnicy 1m.

Zaplanowano eksperyment walidujący wyniki modelowania, w którym nacięte dyski drewna lipowego poddawane są skokowej zmianie RH w komorze klimatycznej. Weryfikacja opiera się na inspekcji wizualnej przyrostu pęknięcia w wyniku suszenia połączonej z bardzo czułym wykrywaniem rozwoju uszkodzenia metodą emisji akustycznej. W pierwszym kroku wyznaczono poziom RH, przy którym w dyskach brak jest naprężeń, a który stanowi punkt startowy eksperymentu. Dla próbek pozyskanych z drewna sezonowanego 2 lata poziom ten odpowiadał ok. 90% RH. Próbki ustabilizowane w tych warunkach poddano w kolejnym kroku spadkowi RH do 50%.

W celu wyznaczenia korelacji pomiędzy ilością jednostek energii rejestrowaną metodą emisji akustycznej a przyrostem pęknięcia przeanalizowano pod tym kątem wyniki otrzymane podczas pomiarów metodą *wedge-splitting*. Wyznaczono krzywe zależności liniowej tych dwóch parametrów, które posłużą do szacowania rozwoju zniszczeń niewidocznych dla oka w monitoringu rzeczywistych obiektów.

4. Synergistyczne układy spieniające oparte na modyfikowanych powierzchniowo nanocząstkach magnetycznych i biodegradowalnych surfaktantach aminokwasowych w kontrolowanej destabilizacji pian rzeczywistych w polu magnetycznym

Projekt badawczy "PRELUDIUM" NCN nr 2022/45/N/ST8/02307 [2023-2025]

(kierownik projektu: mgr Mariusz Borkowski,

opiekun projektu: dr hab. Jan Zawala, prof. IKiFP PAN)

W ramach projektu przeprowadzono syntezy nanomateriałów magneto-reaktywnych o modyfikowanej powierzchni, typu core-shell gdzie jako rdzeń zastosowano magnetyt a jako warstwę zewnętrzną - krzemionkę. Uzyskane materiały dogłębnie scharakteryzowano pod kątem rozmiaru i morfologii (SEM, AFM, DLS) oraz składu chemicznego (UV-VIS, FT-IR, RAMAN, XPS). Zsyntezowane materiały zastosowano w mieszaninach synergistycznych z amfoterycznym surfaktantem C12-Arg, dla którego wyznaczono własności adsorpcyjne poprzez pomiary napięć powierzchniowych oraz spektroskopię SFG. Badania dla czystego surfaktantu pokazały, iż własności powierzchniowe (pomiary napięć powierzchniowych) surfaktantu różnią się w zależności od pH. Fakt ten uzasadniono własnościami amfoterycznymi (forma kationowa i anionowa) surfaktantu potwierdzonymi pomiarami spektroskopii SFG. Własności mieszanin synergistycznych opartych na amfoterycznym surfaktancie C12-ARG oraz wybranym typie nanomateriałów przeprowadzono z zastosowaniem pomiarów napięć powierzchniowych oraz spektroskopii SFG. W przypadku pomiarów SFG dodatkowo wykonano je z zastosowaniem zewnętrznego pola magnetycznego. Badania pokazały, iż w przypadku układów gdzie surfaktant jest przeciwnie naładowany względem nanocząstek w danym pH obserwuje się synergistyczne obniżenie napięcia powierzchniowego oraz zmiany w sygnałach na widmach SFG względem czystych mieszanin. Pomiary SFG z zastosowaniem pola magnetycznego ukazały zależność tego efektu od przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego. Własności stabilizujące film pianowy jak również wpływ pola magnetycznego przeprowadzono z zastosowaniem dynamicznej interferometrii filmu pianowego. Przeprowadzone prace eksperymentalne wykazały adsorpcyjne własności synergistyczne testowanych układów zależne od zewnętrznego pola magnetycznego. W dalszych badaniach sprawdzono również własności spieniające czystego surfaktantu oraz mieszanin z nanomateriałami w wybranych pH przy użyciu metody dynamicznej analizy piany. Badania ukazały, iż dodatek cząstek o przeciwnym ładunku względem surfaktantu w danym pH prowadzi do zwiększonej spienialności oraz stabilności utworzonej w danych warunkach piany.

Projekty badawcze NCN „Beethoven Life”

1. Struktura i funkcja enzymów glicynowo-rodnikowych katalizujących addycję do fumaranu: biochemia, modelowanie i zastosowanie

Projekt badawczy „BEETHOVEN LIFE” NCN nr 2018/31/F/NZ1/01856 [2020-2023]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Maciej Szaleniec, dr Ivana Aleksić, mgr Gabriela Oleksy, mgr Anna Sekuła)

Celem projektu jest przebadanie biochemii rodinkowych enzymów glicynowych katalizujących addycję do fumaranu (tj. enzymów FAE – fumarate adding enzymes). Prototypowym przedstawicielem enzymów z tej klasy jest syntaza benzoilobursztynianowa (BSS) z *Thaurea aromatica*, katalizująca addycję toluenu do fumaranu, w wyniku czego powstaje (R)-benzoilobursztynian.

W ramach prowadzonych obliczeń dokończono opis mechanizmu reakcji metodami QM:MM uzyskując pełen profil energetyczny reakcji dla monoprotonowanego fumaranu. Obliczenia wykazały, że bariera związana z aktywacją rodinkową cysteiny wynosi 55.9 kJ/mol, aktywacją toluenu wynosi tylko 20 kJ/mol, z utworzeniem wiązania C-C 45.8 kJ/mol a bariera wiązania z wygaszeniem rodnika aż 60.5 kJ/mol. Na tej podstawie można oczekiwać obniżonego kinetycznego efektu izotopowego, ze względu na względną bliskość bariery słabo wrażliwej na deuterowanie toluenu (tj. utworzenie wiązania C-C) jak i etap wrażliwy (wygaszenie rodnika), w którym jednak może następować częściowa wymiana H/D z rozpuszczalnikiem.

Ponadto obliczenia umożliwiły wykazanie regioselektywności ataku na dystalny atom węgla w wiązaniu C=C fumaranu dla fumaranu związanego w konformacji proR oraz odwrócenie preferencji w przypadku wiązania w konformacji proS. Skutkiem tego efektu jest wysoka enancjoselektywność reakcji (powstaje wyłącznie izomer R-benzoilobursztynianu).

Ponadto przeprowadzono modelowanie enancjoselektywności procesu aktywacji Cys493 w reakcji z rodinkową Gly829. Modelowanie przeprowadzono dla kompleksu enzym:substraty, enzym:produkt oraz dla apoenzymu. Obliczenia wykazały preferencję dla przeniesienia atomu wodoru z grupy SH cysteiny na rodinkową Gly w konformacji proR, jednak nie wykluczyły kinetycznej możliwości aktywacji w konfiguracji proS (różnica 22 kJ/mol). W szczególności badania te wyjaśniają możliwość stopniowej wymiany izotopowej atomu wodoru w rodinkowej Gly co jest obserwowane w widmie EPR po inkubacji aktywnego enzymu w D₂O.

Z kolei dla apo-enzymu wykazano, że po pierwsze proces aktywacji Cys zachodzi wolniej niż w przypadku kompleksu E:S lub E:P oraz łatwiej zachodzi przeniesienie atomu wodoru w konfiguracji proS niż w proR. Aby jednak możliwe było zajście aktywacji w konfiguracji proS wymagana jest zmiana konformacji centrum aktywnego, która wymaga około 80 kJ/mol.

W ramach badań eksperymentalnych został zmierzony wpływ obecności inhibitorów, benzaldehydu oraz alkoholu benzyłowego, na szybkość reakcji z toluenem i fumaranem dla natywnej BSS z *T. aromatica* K172. Przeprowadzono również badania kinetyczne wyznaczając obserwowane stałe dla toluenu oraz opracowując metodologię pomiarową dla ksylenów. Powtórzono również eksperyment inkubacji BSS w D₂O i zmierzono widma EPR, które potwierdziły wymianę izotopową na rodinkowej Gly. Zoptymalizowano również metodę oczyszczania rekombinowanej BSS z komórek *E. coli* BL21 z wykorzystaniem kulek magnetycznych sfunkcjonalizowanych streptawidyną. Tak oczyszczony enzymu przepadano z wykorzystaniem fotometrii masowej co pozwoliło na przygotowanie próbek białka do analizy struktury techniką kriomikroskopii elektronowej (cryo-EM).

Projekty badawcze NCN „Solar-Driven Chemistry”

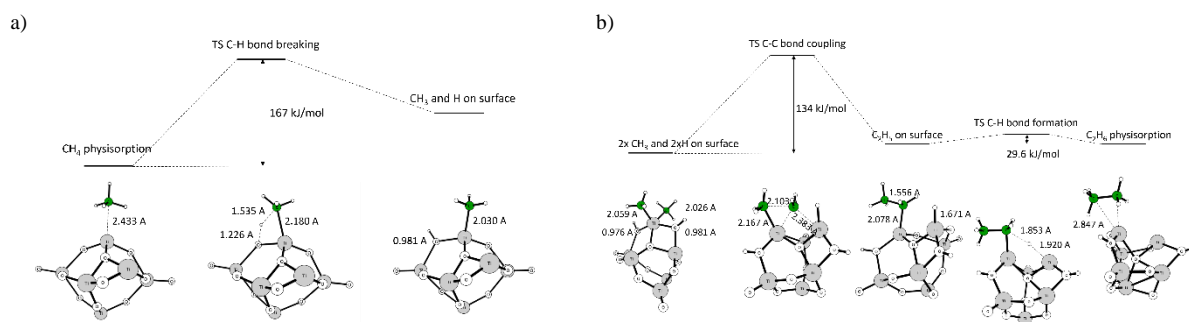
1. SolarMethaChem: Procesy wywołane światłem słonecznym dla fotochemicznej konwersji metanu

Projekt badawczy „Solar-Driven Chemistry” NCN nr 2019/01/Y/ST4/00024 [2020-2023]
(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN)

Wykorzystując metodę DFT:PBE+D3/def2-SVP w ujęciu klasterowym wyznaczono struktury geometryczne i elektronowe katalizatorów badanych w reakcji fotokatalitycznego sprzężenia metanu tj. układów M/HPA oraz M/HPA/TiO₂ (M = Ag, Au, Cu, Pd, Pt jako atomy obojętne elektrycznie lub jony na swoich popularnych stopniach utlenienia; HPA = HPW, HPMo), gdzie jako model TiO₂ wykorzystano klaster wycięty z powierzchni (101) anatazu. Stwierdzono, że orbitale HOMO układów M/HPA składają się głównie z orbitali metali przejściowych, zaś orbitale LUMO zlokalizowane są w obrębie heteropolianionów. W kolejnym kroku zbadano reaktywność w/w układów w stosunku do grupy metylowej, benzenu i tlenku węgla będących reagentami w procesach konwersji metanu. Wszystkie metale tworzą termodynamicznie stabilne wiązania z badanymi cząsteczkami, przy czym zaobserwowano, że silniejsze wiązania tworzą jony metali niż obojętne atomy.

Następnie określono, jak zmienia się geometria oraz struktura elektronowa układów, w których na dwutlenku tytanu osadzono miedź metaliczną w postaci pojedynczych atomów oraz małych klastrów. Na skutek osadzenia na TiO₂ faza metaliczna ulega utlenieniu – elektrony z miedzi przepływają na nośnik, gdzie lokalizują się głównie na atomach tlenu będących w bezpośrednim sąsiedztwie atomów Cu. Taka reorganizacja ładunku powoduje, że na powierzchni układu Cu/TiO₂ tworzone są nowe centra aktywne: atomy miedzi nabywają właściwości elektrofilowych, zaś atomy tlenu na granicy faz stają się silniejszymi centrami nukleofilowymi w porównaniu do tych, które obecne są na czystej powierzchni dwutlenku tytanu.

Zbadano również pełny mechanizm reakcji sprzężenia metanu do etanu zachodzący na TiO₂ z wprowadzoną wakancją tlenową - profil energetyczny przedstawiono na Rysunku poniżej. Obliczenia wykonano metodą DFT:B3LYP/LANLDDZ. Etapem limitującym jest rozerwanie pierwszego wiązania C-H (bariera energetyczna tego procesu wynosi 167 kJ/mol), tworzenie wiązania C-C obarczone jest niższym nakładem energetycznym (bariera wynosi 134 kJ/mol).



Rysunek. Profil energetyczny reakcji sprzężenia CH₄ na TiO₂: a) aktywacja wiązania C-H w metanie; b) sprzężenie grup metylowych i utworzenie etanu.

Projekty badawcze NCN „GRIEG”

1. Craquelure – Model obrazów ze spękaniem wspierający ustalenie racjonalnych wytycznych środowiskowych w muzeach

Projekt badawczy „GRIEG” NCN nr 2019/34/H/HS2/00581 [2020-2024]

(kierownik projektu: *prof. dr hab. Łukasz Bratasz*, wykonawcy: : *dr Marcin Bury, dr Marcin Strojceki, dr Sergii Antropov, mgr inż. Katarzyna Poznańska*)

W 2023 roku zespół badawczy realizujący projekt GRIEG Craquelure kontynuował prace nad rozwojem bazy danych właściwości materiałów historycznych i artystycznych stosowanych w malarstwie oraz materiałów współczesnych stosowanych do utrwalania warstwy malarskiej. Wykonane w poprzednich latach pomiary modułu sprężystości, odkształcenia przy zerwaniu oraz izoterm pęcznienia i skurczu farb temperowych rozszerzono o określenie odporności na pęknięcie farb temperowych i olejnych.

Prace eksperymentalne były możliwe dzięki adaptacji standardowej metody ASTM D5528 – 13 do rozmiarów dostępnych farb olejnych dla wybranych farb olejnych z Kolekcji Referencyjnej Farb dr. Mecklenburga po około 30 latach suszenia. Nowa procedura eksperymentalna pozwoliła poprawić statystyki pomiarów, ale także uzyskać wgląd w głębokościowe profile odporności na pęknięcie niektórych farb. Wartości odporności na pęknięcie G_{IC} są najniższe dla bieli cynkowej, umbry surowej i bieli ołowiowej z sykatywą, około 15 J/m², a najwyższe dla sap green. Zmienna jednorodność niektórych farb – bieli ołowiowej, bieli cynkowej, sap green i grynszpanu – znajduje wyraźne odzwierciedlenie w dużym rozrzucie uzyskiwanych wartości. Podobnie niskie wartości G_{IC} uzyskano dla farby temperowej jajowej z bielą ołowiową, azurytem i żółtej ochry. Wyniki wykazały, że niektóre farby są bardziej kruche niż warstwa gruntu na bazie kleju, a co za tym idzie, bardziej podatne na pęknięcie.

Z kolei trójwymiarowy model obrazu posłużył do zbadania pęknięć tempery jajowej i farb olejnych nałożonych na gesso wykonane zgodnie z procedurami historycznymi. Przeanalizowano dwa scenariusze rozwoju naprężeń: skumulowany skurcz suszenia farb lub zapraw, na skutek stopniowej utraty wody lub ewolucji składu molekularnego spoiw oraz pęcznienie podłoża drewnianego pod wpływem zmian wilgotności względnej. Oszacowano stosunki odległości pomiędzy pęknięciami w kierunku stycznym i wzdłużnym panelu drewnianego do grubości warstwy dla rosnących wielkości odpowiedzi wymiarowej materiałów w obu scenariuszach. Wartości krytyczne stosunków, dla których naprężenie w punkcie środkowym pomiędzy pęknięciami spadło poniżej wartości wywołującej odkształcenie przy zerwaniu materiałów i wystąpieniu nasycenia wzorów pęknięć, wynosiły odpowiednio w przybliżeniu 3-4 lub 5-6 dla farb i zaprawy. Odległość krytyczna znormalizowana do grubości zaprawy pomiędzy pęknięciami równoległymi do słoju drewna, wywołana pęcznieniem podłoża drewnianego na skutek zmian wilgotności względnej w zakresie 50 – 70%, wynosiła 6. Badania wykazały, że rozstawy pęknięć w w pełni rozwiniętych układach pęknięć pozostają wrażliwe jedynie na grubość warstw farby lub zaprawy, którą można zatem wywnioskować z geometrii układu pęknięć. Stwierdzono, że istniejące wady zaprawy nie zwiększają ryzyka rozwoju nowych pęknięć.

2. Teranostyczne nanonośniki dla dostarczania leków w chorobach centralnego układu nerwowego

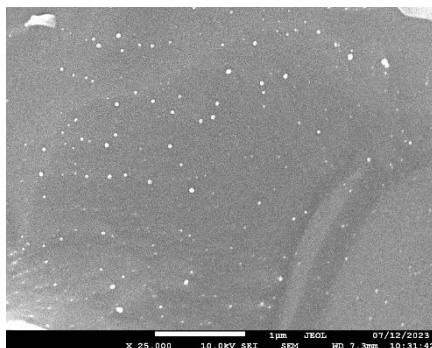
Projekt badawczy „GRIEG” NCN nr 2019/34/H/ST5/00578 [2021-2024]

(kierownik projektu: prof. dr. hab. Piotr Warszyński)

Zapobieganie i leczenie chorób zwyrodnieniowych układu nerwowego oraz uszkodzeń mózgu związanych z udarami to główne i wciąż nierozwiązane problemy współczesnej medycyny. Pomimo postępu w zrozumieniu molekularnych mechanizmów procesów, w których ulegają uszkodzeniu funkcje neuronów, oraz metod zapobiegania im, tylko niewielka liczba leków jest wykorzystywana w zastosowaniach klinicznych, a ich skuteczność w leczeniu udaru mózgu i chorób neurodegeneracyjnych nie jest zadowalająca. Jednym z głównych ograniczeń w dotychczasowym leczeniu jest nieefektywne dostarczanie leków o działaniu neuroprotekcyjnym do uszkodzonej części mózgu, jak również trudność w ocenie czy lek jest dobrze adresowany, czyli że dociera do miejsca przeznaczenia. Teranostyka jest nową dziedziną medycyny polegająca na połączeniu funkcji terapeutycznej i diagnostycznej w jednym preparacie. Zastosowanie nanotechnologii w teranostyce pozwala na opracowanie nośników leków, które jednocześnie dostarczą substancję leczniczą i będą pełnić funkcję diagnostyczną.

Głównym celem projektu jest opracowanie nowej strategii dostarczania leków o działaniu neuroprotekcyjnym przy użyciu nanonośników, będących w stanie przekroczyć barierę krew-mózg, nie wykazujących negatywnego wpływu na jej normalne funkcjonowanie, a których obecność w danym organie może zostać wykryta poprzez obrazowanie metodą rezonansu jądrowego (MRI). Projekt jest realizowany przez międzynarodowe konsorcjum naukowe złożone z Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, Instytutu Farmakologii im. Jerzego Maja PAN, Instytutu Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN, ze strony polskiej, oraz SINTEF Oslo i Szpitala Uniwersyteckiego w Oslo, ze strony norweskiej.

W 2023 roku kontynuowaliśmy badania dotyczące enkapsulacji kwasu karnozowego (substancji o działaniu neuroprotekcyjnym) w polielektrolitowych nanonośnikach. Nanonośniki kwasu karnozowego formowano metodą sekwencyjnej adsorpcji naładowanych nano-objektów, zwaną metodą warstwa po warstwie. Nośniki te były modyfikowane do obrazowania metodą MRI jak i metodą optyczną tj. fluorescencyjną. Zewnętrzna warstwa polielektrolitowych nanonośników została sfunkcjonalizowana poprzez tworzenie otoczki PEG mającej zapewnić wydłużoną cyrkulację nanonośników po podaniu, a jednocześnie umożliwić dotarcie do bariery krew-mózg. Średni rozmiar opracowanych teranostycznych nanonośników wynosił ok. 150nm. Rysunek 1 przedstawia obraz cryo-SEM badanych nanonośników. Opracowane nanonośniki przekazano partnerom projektowym na dalsze badania w modelach *in vitro* oraz *in vivo*.



Rysunek 1. Obraz cryo-SEM nanonośników znaczonych gadolinem

Projekty badawcze NCN „Miniatura”

1. Znaczenie utleniających i kwasowo-zasadowych właściwości centrów aktywnych dla ich aktywności - badania obliczeniowe dla enzymów zależnych od niehemowego żelaza

Projekt badawczy "Miniatura" NCN 2022/06/X/ST4/00078 [2022-2023]
(kierownik projektu: dr Zuzanna Wojdyła)

W ramach projektu zrealizowano krótki (trzymiesięczny) staż podoktorski w J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry w grupie Computational Chemistry pod opieką RNDr Martina Srneca. Celem stażu było opracowanie modelu enzymu zależnego od pteryny, który będzie zgodny z aktualnymi wynikami badań eksperymentalnych, by na jego podstawie, w następnym kroku, opisać zależność aktywności tego enzymu od utleniających i kwasowo-zasadowych właściwości jego centrum aktywnego.

Badania rozpoczęto od modelowania metodami mechaniki klasycznej – dokowania kofaktora (4a-hydroksytetrahydrobiopteryny) i substratu reakcji w kieszeni wiążącej enzymu i symulacji dynamiki molekularnej (MD) dla uzyskanych kompleksów. Następnie, dla wybranych na podstawie analizy symulacji MD kompleksów enzym:kofaktor:substrat przeprowadzono optymalizacje QM/MM oraz zestawiono wyniki obliczeń TD-DFT z wynikami eksperymentalnymi (spektroskopia UV-vis).

Aby opracować model aktywowanego enzymu (zawierającego ugrupowanie ferrylowe), przeprowadzono modelowanie QM/MM reakcji z udziałem tlenu cząsteczkowego. Równolegle przygotowano zestaw uproszczonych (pomocniczych) modeli centrum aktywnego. Zbadanie ich utleniających i kwasowo-zasadowych właściwości (odpowiednio potencjałów redukcji i stałych kwasowości) w połączeniu z mechanizmem reakcji przeniesienia atomu wodoru (dla zestawu pomocniczych substratów) pozwoli określić w jakim stopniu właściwości utleniające i kwasowo-zasadowe centrum aktywnego badanego enzymu modulują jego aktywność.

2. Synteza nowych koniugatów neuroleptyków będących pochodnymi fenotiazyny z nanocząstkami złota oraz ocena ich aktywności w procesach fibrylacji modelowych białek

Projekt badawczy "Miniatura" NCN nr 2022/06/X/ST5/00350 [2022-2023]

(kierownik projektu: dr hab. Magdalena Oćwieja, prof. IKiFP PAN)

Dwa typy nowych koniugatów neuroleptyków będących pochodnymi fenotiazyny (PTZ) z nanocząstkami złota otrzymano prowadząc proces wymiany anionów cytrynianowych na powierzchni AuNPs (o średniej wielkości 15 ± 6 nm oraz 55 ± 3 nm) w obecności jonów chlorkowych. W pracach badawczych uwagę skupiono na otrzymaniu koniugatów chloropromazyny (CPZ) oraz flufenazyny (FPZ). Za pomocą badań elektrokinetycznych wykazano, że potencjał zeta koniugatów PTZ-AuNPs silnie zależy od ilości zaadsorbowanych cząsteczek PTZ. Przy całkowitym wysyceniu powierzchni kationami PTZ otrzymywano koniugaty charakteryzujące się dodatnim potencjałem zeta (50 ± 8 mV dla pH 5,8, siła jonowa 1 mol/dm^3). Na podstawie badań przeprowadzonych z użyciem techniki DLS i spektroskopii UVvis wykazano, że dla sił jonowych powyżej 10 mol/dm^3 następował proces destabilizacji koniugatów. Wyniki badań uzyskane techniką ELS wykazały, że potencjał zeta koniugatów maleje wraz ze wzrostem pH (np. dla CPZ-AuNPs 57 ± 3 mV oraz -50 ± 2 mV dla pH 4,0 oraz 10,1). Koniugaty CPZ-AuNPs posiadały punkt izoelektryczny w pH 8,8, zaś koniugaty FPZ-AuNPs w pH 8,5. Za pomocą pomiarów spektroskopowych (UVvis, SERS) określono strukturę adsorpcyjną leków oraz wykazano niestabilność koniugatów w warunkach zasadowych. Ponadto, wyniki pomiarów spektroskopowych w zakresie UVvis dowiodły, że koniugaty zdyspergowane w medium DMEM suplementowanym FBS były stabilne w temperaturze 37°C przez okres 28-30 godzin. Za pomocą testu MTT wykazano, że CPZ i FPZ w stężeniu 10^{-3} mol/dm^3 obniżały żywotność komórek SH-SY5Y do 64-73%. AuNPs stabilizowane anionami cytrynianowymi do stężenia 50 mg L^{-1} nie obniżały żywotności komórek, dlatego do oceny cytotoksyczności koniugatów wybrano ten zakres stężeń. Badania cytotoksyczności koniugatów CPZ-AuNPs i FPZ-AuNPs (charakteryzujących się zróżnicowanym składem: PTZ w stężeniu 10^{-6} , 5×10^{-5} i 10^{-4} mol/dm^3) ujawniły, że cytotoksyczność koniugatów była znacznie wyższa niż AuNPs przy czym koniugaty FPZ-AuNPs były mniej toksyczne niż CPZ-AuNPs. Koniugaty w składzie $20 \text{ mg/L AuNPs} / 10^{-6} \text{ mol/dm}^3 \text{ PTZ}$ zostały wybrane do badań fibrylizacji. Wyniki badań adsorpcji białek na powierzchniach monowarstw AuNPs i PTZ-AuNPs dowiodły, że proces jest efektywny zarówno w pH 7,4 oraz 11, choć w warunkach zasadowych ilość zaadsorbowanego białka była znacznie niższa niż warunkach obojętnych. Tym samym udowodniono dominującą rolę oddziaływań elektrostatycznych w procesach tworzenia warstewek białek oraz wpływ heterogenicznego rozkładu ładunku białka na adsorpcję zachodzącą dla cząstek charakteryzujących się tym samym znakiem ładunku, co warstwy AuNPs i PTZ-AuNPs. Pomiar kinetyk fibrylizacji przeprowadzone przy użyciu testu ThT w obecności PTZ, cytrynianu trisodu, AuNPs nie wykazały, aby substancje wykazywały właściwości profibrylarne w pH 7,4 i temperaturze 37°C . W pH 7,4 i 11,0 CPZ i FPZ najbardziej hamowały powstawanie fibryl. Zarówno ujemnie jak i dodatnio naładowane nanocząstki nieznacznie hamowały powstawanie fibryl, ale efekt był widoczny w podwyższonej temperaturze (60°C) po czasie inkubacji dłuższym niż 350 godzin. Nie odnotowano istotnych różnic w hamowaniu procesu fibrylizacji przez AuNPs i koniugaty PTZ-AuNPs. Na podstawie badań mikroskopowych wykazano, że fibryle utworzone w obecności koniugatów CTZ-AuNPs charakteryzowały się znacznie krótszą długością niż fibryle kontrolne. Podsumowując, wykazano stabilność i aktywność dodatnio naładowanych koniugatów PTZ-AuNPs w hamowaniu procesu fibrylizacji wybranych białek w pH 7,4 i podwyższonej temperaturze, a ponadto wykazano ich cytotoksyczność wobec komórek nerwiaka niedojrzałego (SH-SY5Y i SK-N-SH).

3. Termoczule emulsje wodno-wodne do zastosowań biomedycznych stabilizowane kopolimerami

Projekt badawczy "Miniatura" NCN nr 2023/07/X/ST4/01335 [2023-2024]

(kierownik projektu: dr inż. Andrzej Baliś)

W ramach zadania realizowanego od końca listopada 2023 zakupiłem potrzebny sprzęt laboratoryjny oraz odczynniki wymagane do syntezy kopolimerów i docelowych emulsji. Wykonałem prace koncepcyjno-organizacyjne oraz zorganizowano dostęp do laboratorium 025 w którym będę przeprowadzał polimeryzacje RAFT. W ramach prac koncepcyjnych wykonano również obrazy na mikroskopii konfokalnej przykładowych emulsji w/w stabilizowanych mikrożelami BLG, wybarwianych barwnikiem Fast Green, dając tym samym gotowy warsztat dla termoczulych emulsji przewidzianych w niniejszym projekcie. Wyniki załączono poniżej na rys. 1.

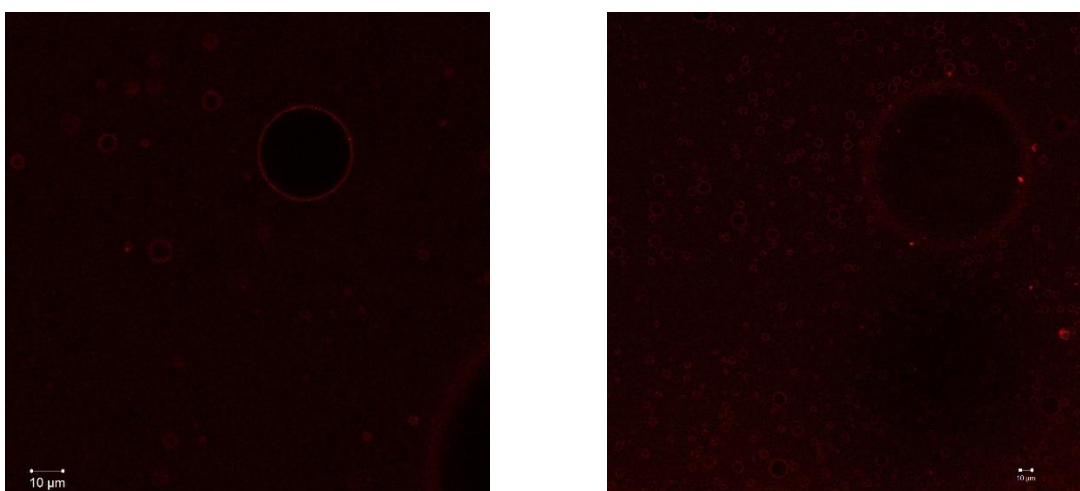


Fig. 1. Obrazowanie mikroskopią konfokalną emulsji PEG10k(aq) w DEX75k(aq) stabilizowanej nanocząstkami BLG (pH białka natywnego = 6) wybarwionej barwnikiem Fast Green.

4. Stabilność i własności fizykochemiczne pian wytwarzanych na bazie mieszanin związków powierzchniowo czynnych i polielektrolitów

Projekt badawczy "Miniatura" NCN nr 2023/07/X/ST11/00476 [2023-2024]

(kierownik projektu: dr inż. Dominik Kosior)

Głównym celem niniejszego projektu badawczego jest zbadanie potencjalnego zastosowania *bio*-polielektrolitów i *bio*-surfaktantów w stabilizacji filmów pianowych tworzonych w warunkach statycznych i dynamicznych. Wybór systemu polielektrolit/surfaktant będzie podyktowany właściwościami komponentów, ze szczególnym naciskiem na: biodegradowalność, aktywność biologiczną (antyseptyczną) i biokompatybilność. Właściwości te są interesujące z punktu widzenia dalszego rozwoju technologii wytwarzania pian do zastosowania w dekontaminacji czynników chemicznych, biologicznych i skażeń radioaktywnych. Wykorzystując komplementarne podejście, tj. zastosowanie technik eksperymentalnych pozwalających na badanie filmów pianowych w warunkach statycznych i dynamicznych, synergistyczne i antagonistyczne efekty mieszanin polielektrolit/surfaktant i ich wpływ na stabilność filmów pianowych zostaną dokładnie i systematycznie zbadane. Wyniki uzyskane w ramach tego projektu zostaną wykorzystane do weryfikacji następujących hipotez badawczych: (i) wpływ długości łańcucha polielektrolitu i jego konformacja oraz (ii) wpływ struktury dynamicznej warstwy adsorpcyjnej są kluczowe dla kinetyki wyciekania filmów pianowych.

Rozpoczęto pomiary napięć powierzchniowych dla mieszanin polielektrolitów i związków powierzchniowo czynnych. Przeprowadzono również wstępne badania nad wpływem dodatku polielektrolitów na prędkości pęcherzyków w roztworach związków powierzchniowo czynnych. Ponadto, rozpoczęto pomiary mające na celu dokładną charakterystykę fizykochemiczną kwasu poliglutaminowego (PGA): pomiary lepkości i gęstości roztworów (PGA) w celu wyznaczenia struktury i gęstości właściwej polielektrolitu, pomiary potencjału elektrokinetycznego polielektrolitu.

5. Wpływ nanokrystalizacji Mg na strukturę i odporność korozyjną fosforanowych warstw konwersyjnych do zastosowań biomedycznych

Projekt badawczy "Miniatura" NCN nr 2023/07/X/ST11/00036 [2023-2024]

(kierownik projektu: dr inż. Konrad Skowron)

W ramach prac prowadzonych w roku rozliczeniowym 2023 grantu Miniatura VII zostało zaprojektowane i skonstruowane urządzenie umożliwiające przeprowadzenie powierzchniowego silnego odkształcenia plastycznego na zasadzie powierzchniowej mechanicznej obróbki ścierniej (SMAT). Metoda SMAT polega na odkształceniu plastycznym powierzchni obrabianej powtarzającymi się, wysokoenergetycznymi uderzeniami kulistym ścierniwem o średnicy kilku milimetrów. W zaproponowanym rozwiązaniu, próbka umieszczona jest nieruchomo w pozycji horyzontalnej w komorze, której podstawa drga z dużą częstotliwością wprawiając ścierniwo w ruch. Wielokierunkowe uderzenia powodują rozdrobnienie ziaren obrabianego metalu do skali nanometrycznej. Skonstruowane urządzenie oparte jest na komercyjnym generatorze drgań oraz stowarzyszonym z nim generatorze sygnału i zasilaczowi.

Przeprowadzony przegląd literaturowy wykazał, że największym problemem przy przeprowadzaniu powierzchniowego odkształcenia przy pomocy metod opartych na peeningu jest kontaminacja próbek żelazem pochodzącym z materiału ściernego, a także, jak i w przypadku metody SMAT z samej komory, w której przeprowadzany jest proces. Dlatego też, w skonstruowanym układzie całkowicie wyeliminowane elementy stalowe. Komora została wykonana z obojętnego chemicznie materiału, a jej podstawa z komercyjnie czystego Mg. Do przeprowadzenia testów odkształcenia plastycznego próbek magnezu użyto znacznie twardszego materiału niż stal – kulek wykonanych z ZrO_2 .

Przeprowadzono próby odkształcania metodą SMAT próbek Mg o czystości min. 99.95%. Zastosowano kulki wykonane z ZrO_2 o średnicach 2 mm i 4 mm, proces przeprowadzono przez 1 godzinę, zastosowano amplitudę drgań podstawy komory 50 Hz. Rozpoczęto testy elektrochemiczne w roztworach NaCl tak przygotowanych próbek. Zbudowano układy pomiarowe służące do zbierania wydzielonego wodoru jedynie z powierzchni jaka została poddana procesowi SMAT. Rozpoczęto testy porównawcze próbek poddanych powierzchniowemu odkształceniu i pokrytych warstwami konwersyjnymi z próbkami nie poddanymi SMAT oraz pokrytymi warstwami konwersyjnymi.

Projekty badawcze NCBR „EIG CONCERT-JAPAN”

1. Wielofunkcyjne, wysokosprawne materiały: porowate materiały kompozytowe do procesów membranowych

Projekt badawczy „EIG CONCERT-JAPAN” NCBR nr /1/2019 [2019-2023]

(kierownik projektu: dr hab. inż. Aleksandra Pacuła)

Celem badań była synteza i charakterystyka materiałów węglowych przeznaczonych do otrzymania polimerowych membran kompozytowych. Badania obejmowały również wyznaczenie przewodnictwa elektrycznego oraz stałej dielektrycznej membran. Węgle zsyntezowano metodą pirolizy acetonitrylu w temp. 600 i 700 °C, w obecności porowatego podłoża, które stanowiła mieszanina tlenków metali generowana in-situ w wyniku termicznego rozkładu warstwowych podwójnych wodorotlenków o różnym składzie chemicznym. Były to układy magnezowo-glinowe, w których Mg lub Al został częściowo podstawiony przez Mn, Fe, Cu (MgMnAl, MgFeAl, MgCuAl) lub układy niklowo-glinowe (NiAl). Otrzymano porowate, domieszkowane azotem węgle różniące się morfologią ziaren węglowych (płytkowe i rurkowe), rozwinięciem powierzchni, w tym udziałem mikro- i mezoporów. Materiały węglowe zbudowane były z węgla turbostratycznego zawierającego defekty strukturalne – wykazującego uporządkowanie strukturalne zbliżone do grafitu ale o odległości międzywarstwowej większej niż obserwowanej w graficie, i z pewnej ilości węgla amorficznego. Membrany polimerowe przygotowano z udziałem biokompatybilnego polimeru – polikaprolaktonu (PCL) stosując dwie metody. Jedną z nich obejmowała przygotowanie zawiesiny PCL w cieczy o niskiej lotności (N-metylopirolidon (NMP), temp. wrzenia 202 – 204 °C) i stężeniu PCL = 15 % (metoda I), a następnie rozproszaniu zawiesiny PCL na powierzchni szklanej płytki o wymiarach 15 cm x 20 cm aplikatorem o zadanej grubości 200 μm i wydzieleniu membran w kąpeli koagulacyjnej (izopropanolu). Druga metoda polegała na przygotowaniu zawiesiny PCL w cieczy o wysokiej lotności (dichlorometan (DCM), temp. wrzenia 39,6 °C) i stężeniu PCL = 5 % (metoda II), a następnie rozproszaniu zawiesiny PCL na dnie szalki Petriego o średnicy 9,4 cm i odparowaniu DCM. W obu przypadkach otrzymano membrany o grubości rzędu 100 μm. Ze względu na ograniczenia wynikające z trwałości membran dodatek węgla w membranach przygotowanych metodą I był niewielki i wynosił 0.7 % wag., natomiast dodatek węgla do membran przygotowanych metodą II był większy 2.4 – 4.6 % wag. Przewodnictwo elektryczne membran będących kompozytami PCL i składnika węglowego wyznaczono mierząc opór elektryczny membran, a stałą dielektryczną wyznaczono w oparciu o pomiar pojemności elektrycznej. Pomiar wykonano przy pomocy miernika LRC z użyciem różnych częstotliwości (ν) (100 Hz – 1 MHz) prądu zmiennego, stosując do opisu badanego układu - równoległy układ zastępczy. Membrana była umieszczona między dwoma mosiężnymi walcami o tej samej średnicy (ok. 4 cm), od strony wypolerowanej i oczyszczonej powierzchni (powierzchnia kontaktu krążka mosiężnego z membraną wynosiła 12.2 cm²). Porównano dane (przewodnictwo elektryczne i stałą dielektryczną) wyznaczone dla $\nu = 1$ kHz. Przewodnictwo elektryczne membran PCL bez dodatku węgla (dla obu metod) wynosiło $2,4 - 3,0 \times 10^{-10}$ S m⁻¹. Niewielki 0.7 % wag. dodatek węgla nie wpływał na poprawę przewodnictwa elektrycznego membran kompozytowych przygotowanych metodą I. Dopiero większy dodatek węgla możliwy stosując metodą II pozwolił na otrzymanie przewodzących membran kompozytowych. Okazało się, że ziarna płytkowe w mniejszym stopniu przyczyniały się do poprawy przewodnictwa. Dlatego ta sama ilość dodatku węgla ale o różnej względnej zawartości ziaren rurkowych miała różny wpływ. Największe przewodnictwo $5,4 \times 10^{-4}$ S m⁻¹ wykazywała membrana kompozytowa otrzymana z dodatkiem 4.6 % wag. węgla, w którym dominowały nanorurki węglowe. Stała dielektryczna (ϵ) membran z PCL wynosiła 1.2 – 1.9. Niewielki dodatek węgla nie miał wpływu na wartość ϵ membran kompozytowych ($\epsilon = 1.1 - 1.3$), natomiast większy dodatek w przypadku metody II miał ($\epsilon = 2.2 - 9.14$).

Projekty NCBR „TechMatStrateg”

1. Technologia biorafinacji olejów roślinnych do wytwarzania zaawansowanych materiałów kompozytowych

Projekt badawczy „TECHMATSTRATEG” NCBR nr TECHMATSTRATEG2/407507/1/NCBR/2019 [2019-2022]

(kierownik projektu: dr hab. Maciej Guzik, prof. IKiFP PAN)

Nadrzędnym celem projektu było stworzenie linii demonstracyjnej – modułu biorafinerii do produkcji unikatowej rodziny polimerów bakteryjnych – polihydroksyalkanianów (PHA). Cel ten został zrealizowany - pod koniec 2022 oddano budynek prototypu Biorafinerii na ul. Niezapominajek 8 w Krakowie, do którego przeniesiono całą linię prototypu z wynajmowanych pomieszczeń na ulicy Balickiej 100 w Krakowie. W 2023 poddano walidacji całą linię prototypu i osiągnięto zadawalające parametry. Dokończono doposażanie obudowy prototypu w niezbędne instalacje (np. kontener, linia technologiczna gazów).

Drugim celem projektu było zademonstrowanie potencjału polimerów PHA (w tym PHB) w rozwoju polskiej gospodarki na przykładzie przygotowania kompozytowych materiałów do formowania przestrzennego (np. implantów tkanki kostnej czy też innych zaawansowanych pozaimplantacyjnych form kompozytowych (materiały elastyczne wykorzystywane na potrzeby przemysłu – tekstylia, opakowania spożywcze, zabawki i inne wyroby plastikowe). Do grudnia 2021 w ramach Konsorcjum wytworzono i scharakteryzowano półprodukty do otrzymania kompozytów, mianowicie: proszki ceramiczne, trójwymiarowe, wysokoporowate gąbki ceramiczne oraz wytworzone polimery PHB i aPHA. W następnych krokach z tych materiałów otrzymano kompozyty polimerowe (blendy PHB i aPHA) oraz kompozyty ceramiczno-polimerowe (infiltrowane porowate rusztowania ceramiczne pokryte polimerami (PHB, mcl-PHA)/blendami PHA, a także wytłoczone filamenty polimerów/blend PHA zawierające proszki ceramiczne. Materiały te zostały poddane szerokiej charakterystyce fizykochemicznej i mechanicznej, oraz charakterystyce biologicznej in vitro. Prowadzone były badania mające na celu ocenę wybranych materiałów w modelu króliczym in vivo. Równolegle w Konsorcjum byliśmy w stanie wstępnie zademonstrować przydatność wytworzonych materiałów w zastosowaniach pozaimplantacyjnych (np. druk 3D).

Projekty NCBR „Program operacyjny Inteligentny Rozwój”

1. CULDIGI - Projekt zintegrowanego systemu cyfryzacji, katalogowania i dokumentacji dziedzictwa kulturowego (obrazów oraz artefaktów 2D)

Projekt badawczy „Program operacyjny Inteligentny Rozwój” NCBR nr POIR.04.01.04-00-0145/19 [2021-2023]

(kierownik projektu: dr hab. inż. Jakub Barbasz, prof. IKiFP PAN, dr Leszek Krzemień)

W ramach realizacji projektu zintegrowanego systemu cyfryzacji, katalogowania i dokumentacji dziedzictwa kulturowego (obrazów oraz artefaktów 2D) w roku 2023 ukończono wszystkie prace przewidziane we wniosku.

Zbudowano urządzenie skanujące, umożliwiające zbieranie danych obrazowych z wysoką rozdzielczością, porównywalną z mikroskopami optycznymi (powiększenia typowo od 0.5x do 4x). Możliwa jest również praca z wyższymi powiększeniami po zastosowaniu opcjonalnych obiektywów. Pozwala to uzyskiwać obrazy o rozdzielczości 1 mikrometr na 2 piksele oraz rozmiarach obszaru skanowanego przekraczające 50 na 50 cm².

Uzyskiwane obrazy mogą być wzbogacone o dodatkowe kanały zawierające informacje takie jak obraz 3D zbierany z czujnika laserowego. Mogą być również skanowane z użyciem bliskiej podczerwieni i w świetle ultrafioletowym.

W ramach projektu osiągnięto rezultatu znacząco przekraczające parametrami (w szczególności szybkością skanowania) dostępne na rynku systemy.

Opracowane rozwiązanie może służyć do szczegółowej i wysoko rozdzielczej archiwizacji dzieł sztuki, badań naukowych oraz cyfrowego udostępniania wszelkich obiektów o charakterze 2D i pseudo 2D (o niewielkiej fakturze – jak np. obrazy olejne, pergaminy czy płyty miedziorytnicze).

Opracowane urządzenie umożliwia również pracę w świetle stroboskopowym synchronizowanym sprzętowo z migawką. W wyniku zastosowania tego rozwiązania możliwe jest ograniczenie ekspozycji cennych dzieł sztuki na promieniowanie widzialne, podczerwone i ultrafioletowe do poziomu 0.1-1% dawki z jaką pracują rozwiązania dostępne na rynku. Możliwe jest skanowanie i archiwizacja wrażliwych na uszkodzenia od promieniowania artefaktów.

Projekty NCBR „TANGO”

1. Opracowanie funkcjonalnej formy aplikacji estrów cukrowych kwasów tłuszczowych na bazie bakteryjnych polihydroksyalkanianów hamujących rozwój komórek nowotworowych

Projekt badawczy „TANGO” NCBR nr TANGO-V-A/0013/2021 [2022-2024]
(kierownik projektu: dr hab. Maciej Guzik, prof. IKiFP PAN)

W aktualnym okresie sprawozdawczym, wykorzystując otrzymane estry cukrowe (ECKT), wytworzono mikroemulsje, a mianowicie PHN-glu, PHN-gal, PHN-lac oraz F-PHN-glu, F-PHN-gal, F-PHN-lac. Charakteryzację tych emulsji pod kątem fizykochemicznym przeprowadzono przy użyciu dynamicznego rozpraszania światła (DLS). Następnie przeprowadzono badania *in vitro*, wykorzystując test przeżywalności MTT na wyselekcjonowanych liniach komórkowych raka jelita grubego (linie: HCT116, SW480, Caco2, Colo205), a także na liniach kontrolnych niezwiązanych z rakiem (HEK293, BJ). W bieżącym roku powtórzono badania *in vitro*, wykorzystując wyłącznie ECKT oraz testowano zarówno same emulsje, jak i te zawierające chemioterapeutyk SN-38. Stwierdzono, że najbardziej toksyczne względem linii rakowych były estry modyfikowane fluorem PHN laktozy (F-PHN-lac) i galaktozy (F-PHN-gal), jak również niemodyfikowane estry laktozowe (PHN-lac). Zakres skutecznych stężeń ECKT wynosił odpowiednio 0,125-0,5 mg/ml. Emulsje niezawierające chemioterapeutyku nie wykazały cytotoksyczności. Chemioterapeutyk w emulsjach nie wykazywał zwiększonej i bardziej selektywnej cytotoksyczności w porównaniu z samym chemioterapeutykiem. Jednak zidentyfikowano dwie linie komórkowe, które najlepiej na nie odpowiadały: SW480 i HCT116.

W celu zwiększenia potencjału terapeutycznego ECKT oraz emulsji na ich bazie, opracowano nową metodę wytwarzania emulsji bazujących na PHN-lac oraz na modyfikowanych fluorem monomerach F-PHN. Tak przygotowane emulsje, zawierające SN-38, poddano również testom MTT na liniach SW480 i HCT116. Po analizach statystycznych stwierdzono, że nowo wytworzona emulsja znacząco wspomaga działanie SN-38, co kwalifikuje ją do kolejnego etapu projektu - testów *in vivo*.

Współpracując z Narodowym Instytutem Onkologii im. Marii Skłodowskiej-Curie w Warszawie, sporządzono wniosek do komisji etycznej w celu uzyskania zgody na eksperymenty na myszach z wszczepionymi komórkami HCT116. Równolegle, zarówno w trakcie, jak i po etapie *in vitro*, przeprowadzono szczegółową analizę rynku w kontekście zastosowań i możliwości wdrożenia zarówno estrów, jak i nowo wytworzonych emulsji w przemyśle medycznym i farmaceutycznym. Analizę zakończono raportem oraz wywiadem eksperckim, w którym specjaliści z Narodowego Instytutu Onkologii, współpracujący z firmami biomedycznymi, odpowiedzieli na pytania zawarte w ankiecie.

Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej

1. PROM Międzynarodowa wymiana stypendialna doktorantów i kadry akademickiej



Projekt NAWA PPI/PRO/2018/1/00006/U/001 PROM [2019-2023]

(kierownik projektu: prof. Tomasz Borowski)

W grudniu 2022 ogłoszono konkurs o stypendia na sfinansowanie kosztów krótkoterminowych staży w zagranicznych jednostkach badawczych doktorantom IKiFP PAN, który został rozstrzygnięty w styczniu 2023.

W 2023 roku zrealizowane zostały następujące wyjazdy w ramach programu PROM:

- dwie doktorantki IKiFP PAN wzięły udział w konferencji zagranicznej;
- dwie doktorantki i dwóch doktorantów IKiFP PAN odbyło staż naukowy w zagranicznej jednostce naukowej;
- jeden doktorant z zagranicznej jednostki naukowej zrealizował staż naukowy w IKiFP PAN w Krakowie;
- jeden pracownik z zagranicznej jednostki naukowej odbył staż naukowy w IKiFP PAN w Krakowie.

2. Struktura i Funkcja Korony Białkowej na Powierzchni Nanocząsteczek



Projekt badawczy NAWA Canaletto PPN/BIT/2021/1/00089/U/00001 [2022-2023]

(kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Barbara Jachimska, wykonawcy: dr Agnieszka Kamińska)

Systemy dostarczania leków (DDS) mają ogromne znaczenie ze względu na ich zdolność do pokonywania barier biologicznych i bezpośredniego dotarcia do celu, unikając skutków ubocznych. Jednak zachowanie nośniki w kontakcie z płynami biologicznymi determinuje „efekt korony białkowej”. Białka adsorbowane na powierzchni DDS, zmieniają w ten sposób ich zachowanie, właściwości fizykochemiczne, stabilność, wychwyty komórkowy, endocytozę i farmakokinetkę. W zależności od powinowactwa do powierzchni nanocząstek koronę białkową można sklasyfikować jako „korona twarda” i „korona miękka”. Twardą koronę tworzą nieodwracalnie związane białka, podczas gdy mięką koronę tworzą białka o niskim powinowactwie, które wykazują odwracalne oddziaływanie z powierzchnią nanocząstek. Ponadto białka tworzące koronę białkową można podzielić na opsoniny i dysopsoniny. Pierwsza grupa sprzyja szybkiemu usuwaniu nanocząstek z krwioobiegu, drugie zaś przedłużają ich krążenie. Poprzez kontrolowanie procesu wiązania dysopsonin z nanocząsteczkami, można zwiększyć biodostępność nano systemów dostarczania leków. Aby to osiągnąć i zrozumieć los nanocząstek w warunkach biologicznych, konieczne jest zbadanie, w jaki sposób projektować efektywną adsorpcję dysopsoniny na powierzchni nanocząsteczkach.

Do badań wybrano mezoporowate nanocząstki krzemionki (MSN) charakteryzujące się wielkością w zakresie 50-300 nm i dużą powierzchnią właściwą (300-1500 m²/g). Na transport nanonośników w warunkach *in vivo* wpływają takie właściwości, jak rozmiar, kształt, stopień hydrofobowości oraz ładunek. MSN charakteryzują się dobrą stabilnością termiczną i chemiczną, łatwością funkcjonalizacji, a także możliwością akumulacji dużej ilości cząstek aktywnych we wnętrzu porowatej struktury. W ramach badań stosowano typ krzemionki MCM-41. Wybrane struktury krzemionkowe posiadają pory w formie kanałów ułożonych równoległe do siebie i tworzące fazę heksagonalną. Aby uzyskać pełną charakterystykę systemu, zbadano właściwości fizykochemiczne MSN w obecności BSA stosując szeroką gamę metod fizykochemicznych takich jak QCM-D, CD, FT-IR, UV-vis, kąt zwilżania, DLS i potencjał zeta.

Programy HORYZONT

1. IPERION-HS - Zintegrowane platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie

Projekt badawczy nr 871034 [2020-2024]

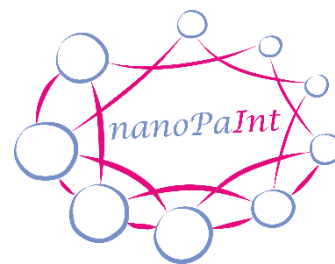
(kierownik projektu: prof. dr hab. Łukasz Bratasz, wykonawcy: inż. Łukasz Berger, dr Marcin Strojcki, dr Marcin Bury)

Celem projektu IPERION HS jest stworzenie i eksploatacja rozproszonej ogólnoeuropejskiej infrastruktury badawczej, wzmacniającej kluczowe krajowe ośrodki badawcze o uznanej pozycji w dziedzinie nauk o dziedzictwie. Nauka o dziedzictwie to młoda i przebiegająca w poprzek tradycyjnych obszarów dziedzina naukowa, obejmująca szeroki zakres dyscyplin badawczych, umożliwiającą głębsze zrozumienie przeszłości i lepszą troskę o przyszłość dziedzictwa kulturowego. Od 2016 r. Nauki o dziedzictwie są włączane do Europejskiego Forum Strategii ds. Infrastruktury Badawczej jako jeden ze strategicznych obszarów w dziedzinie nauk społecznych i humanistycznych, gdzie reprezentowana jest przez europejską infrastrukturę badawczą w dziedzinie nauk o dziedzictwie. IPERION HS zapewni zaawansowanej społeczności nauki o dziedzictwie kolejny poziom integracji ogólnoeuropejskiej w oparciu o Europejską Infrastrukturę Badawczą dla Nauki o Dziedzictwie. Projekt jest kolejnym krokiem w kierunku ujednoczonego naukowego podejścia do najbardziej zaawansowanych analizy instrumentalnych, interpretacji, ochrony, dokumentacji i zarządzania obiektami dziedzictwa w dziedzinie historii sztuki, konserwacji, archeologii i paleontologii. Projekt IPERION HS oferuje nie tylko ponadnarodowy dostęp do szerokiej gamy instrumentów naukowych i zaawansowanych metodologii badawczych, ale po raz pierwszy skoncentruje się na potrzebach konserwacji prewencyjnej w muzeach i innych instytucjach pamięci. Jednym z kluczowych działań będzie opracowanie cyfrowej platformy prewencji konserwatorskiej (PCDP), umożliwiającej użytkownikom modelowanie i planowanie przyszłych scenariuszy ryzyka oraz odpowiednie dostosowywanie działań przeciwdziałających zagrożeniom. PCDP będzie pierwszym krokiem społeczności naukowej zajmującej się dziedzictwem do aktywnego wspierania europejskiej chmury dla otwartej nauki w celu zbudowania konkurencyjnej gospodarki opartej na danych i wiedzy w Europie.

W roku 2023 projektu w dalszym ciągu gruntownie testowano i optymalizowano narzędzia wspomagające podejmowanie decyzji dla praktyków, muzealników i właścicieli obiektów opracowane w latach poprzednich. Testy objęły wszystkie stworzone narzędzia oraz moduł wgrywania danych. Wykryte mankamenty oprogramowania ulepszano i poprawiano w oparciu o dyskusje z partnerami projektu. Podjęto także prace nad integracją oprogramowania COMSOL Multiphysics do obliczeń metodą elementu skończonego z platformą HERIE. Przetestowano wstępnie komunikację w języku Java dla kilku wersji przykładowych plików wygenerowanych przez moduł „application compiler” programu COMSOL. Prace będą kontynuowane w ramach uzgodnionego projektu z Fundacją Gettiego.

Ważnym elementem realizacji projektu było też upowszechnianie wiedzy o platformie HERIE wśród użytkowników końcowych. Zorganizowana dwa międzynarodowe warsztaty: jeden online wraz z Rijksmuseum oraz jeden w Ottawie w Kanadyjskim Instytucie Konserwacji.

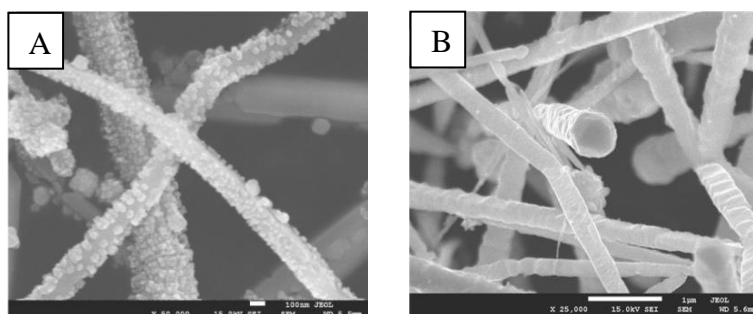
2. NanoPaInt - Dynamika gęstych nanosuspensji: droga do nowych funkcjonalnych materiałów



Projekt badawczy H2020-MSCA-ITN-2020 nr 955612 [2021-2024]
(kierownik projektu: prof. dr. hab. Piotr Warszyński)

Nanotechnologia stanowi innowacyjny kierunek w rozwoju nauki i techniki, który stwarza możliwości postępu w wielu dziedzinach naszego życia. Obejmuje projektowanie, charakterystykę, produkcję i zastosowanie struktur i urządzeń w skali nanometrycznej. Produkty nanotechnologii są niezwykle przydatne ze względu na swoje specyficzne właściwości fizyczne i chemiczne. W ciągu ostatnich kilku lat nanocząstki metali (NPs) wzbudzały duże zainteresowanie ze względu na ich małe wymiary, duży stosunek powierzchni do objętości i specyficzne właściwości różniące się od ich odpowiedników w skali makro. Nanocząsteczki są interesujące nie tylko z naukowego punktu widzenia, ale także w związku z możliwością ich zastosowania w różnych gałęziach przemysłu takich jak np. przemysł kosmetyczny, tekstylny czy też farmaceutyczny. Jednym z zastosowań nanocząstek metali, ze względu na ich niską temperaturę topnienia i wysoką przewodność, jest wytwarzanie tzw. „drukowanej elektroniki”. Tego typu nanocząsteczki są stosowane jako główny składnik materiałów przewodzących, tuszów lub past do produkcji ogniw słonecznych, tranzystorów cienkowarstwowych, drukowanych płytek, transparentnych elektrod przewodzących, elastycznych wyświetlaczy, urządzeń elektrochromowych i ekranów dotykowych. Celem projektu NanoPaInt jest określenie właściwości, modelowanie i zastosowanie silnie oddziałujących układów nanocząstek poza stanem równowagi. Ponadto, celem tego projektu jest wspieranie rozwoju kariery młodych naukowców zarówno w sektorach akademickich, jak i pozaakademickich oraz szkolenie nowej generacji kreatywnych i innowacyjnych początkujących badaczy (ESR) poprzez prowadzenie interdyscyplinarnych badań, udział w lokalnych i ogólnosieciowych działaniach szkoleniowych oraz międzynarodowych stażach.

W trakcie badań prowadzonych w roku 2023 w ramach ESR 13 kontynuowano optymalizację procesu syntezy nanodrutów miedź@srebro o strukturze core@shell (Cu@Ag NWs) oraz ich zastosowania do wytwarzania przewodzących materiałów. W pierwszym etapie badań otrzymano nanodruty miedziane, jako rdzeń struktur „core@shell”. W drugim etapie, na otrzymanych nanodrutach została utworzona srebrna otoczka w wyniku reakcji transmetalacji. Cu@Ag NWs o optymalnych właściwościach fizykochemicznych (morfologia oraz odporność miedzi na niepożądany proces utleniania) otrzymano w obecności kwasu askorbinowego, mającego właściwości zarówno redukujące jak i antyoksydacyjne, co potwierdzono przy użyciu mikroskopii CONFOCAL, SEM oraz metody XPS. Obrazy SEM (Rys. 1) wyraźnie wskazują, iż po dodaniu kwasu askorbinowego (AA) po 3 minutach od dodania AgNO_3 otrzymana srebrna otoczka była bardziej gładka i jednolita (rys. 1B) w porównaniu do tej, która powstała po dodaniu AA bezpośrednio po dodaniu prekursora srebrnej powłoki (rys. 1A). W kolejnym etapie badań, wytworzono pasty na bazie otrzymanych Cu@Ag NWs, które w następnym roku realizacji projektu, zostaną wykorzystane do procesu otrzymywania przewodzących ścieżek lub powłok.



Rys. 1. Obrazy SEM Cu@Ag NWs: kwas askorbinowy dodany bezpośrednio po dodaniu AgNO_3 (A) oraz po 3 minutach (B)..

3. NewCat - Monooksygenazy polisacharydów katalizujące reakcje typowe dla cytochromów P450



Projekt badawczy Horizon Europe EIC-PATHFINDER nr 101046815 [2022-2025]

(kierownik projektu: *prof. dr. hab. Tomasz Borowski*)

wykonawcy: *dr Anna Miłaczewska-Kregiel, dr Anna Kluza, dr Zuzanna Wojdyła*)

Strategia UE Zielony Ład i misja łagodzenia klimatu wymagają zastosowania radykalnie nowych technologii, których nie ma jeszcze na rynku. Projekty EIC Pathfinder wykraczają poza to, co już jest znane i opierają się na interdyscyplinarnej współpracy naukowej, która ma szansę wypracować podstawy nowych i przełomowych technologii. Projekt NewCat został zainspirowany naturą i ma na celu zapewnienie uniwersalnej platformy ułatwiającej syntezę organiczną za pomocą czystych, pozbawionych rozpuszczalników organicznych procesów o niskim zużyciu energii. Wymagana wiedza jest zapewniana przez połączenie najnowocześniejszych metod eksperymentalnych i obliczeniowych z chemii obliczeniowej, inżynierii białek, katalizy enzymatycznej i syntezy nanomateriałów na dużą skalę dostarczonych przez partnerów konsorcjum.

Projekt jest realizowany przez konsorcjum czterech partnerów: Norwegian University of Life Science, Norwegia, koordynator, Politechnika Graz, Austria, IKiFP PAN, Polska i Politechnika Śląska, Polska. Zespół z IKiFP PAN wnosi do projektu swoją wiedzę z zakresu badań obliczeniowych nad metaloenzymami oraz z zakresu krystalografii białek.

Prace prowadzone w 2023 skupiały się na badaniach obliczeniowych, preparatyce białek, krystalizacji enzymów (LPMO o nieznannej strukturze oraz LPMO w niebadanych dotychczas kompleksach), badaniu oddziaływania białko-ligand wybranych LPMO z wytypowaną listą potencjalnych ligandów metodą termoforezy w mikroskali (ang. microscale thermophoresis, MST).

4. GoGreen: green strategies to conserve the past and preserve the future of cultural heritage

Projekt badawczy Horizon Europe HORIZON-WIDERA nr 101060768 [2023-2026]

(kierownik projektu: prof. dr. hab. Łukasz Bratasz

wykonawcy: Łukasz Berger, dr inż. Sonia Bujok, dr Marcin Strojecki, dr Marcin Bury, mgr inż. Magdalena Soboń, mgr Nefeli Avgerou)

Głównym celem projektu GoGreen jest rozpoczęcie zielonej rewolucji poprzez zmianę praktyk w ochronie dziedzictwa kulturowego w kierunku rozwiązań bardziej przyjaznych dla środowiska. Punktem wyjścia jest to, że obecna teoria i praktyka stosowane w konserwacji i prewencji konserwatorskiej w niewystarczającym stopniu uwzględniają wpływ tych działań na środowisko. Ambicją projektu jest podjęcie działań w obu obszarach poprzez promocję z jednej strony zielonych materiałów i zabiegów konserwatorskich, a z drugiej stosowanie strategii prewencji konserwatorskiej uwzględniających wpływ na środowisko. Zespół badawczy IKiFP skupia się na wypracowaniu nowych zrównoważonych strategii regulacji mikroklimatu w budynkach sektora dziedzictwa kulturowego. Racjonalne decyzje dotyczące regulacji klimatu są obecnie utrudnione, przez brak szczegółowej wiedzy o procesach degradacji materiałów historycznych. Aby sprostać temu wyzwaniu, projekt GoGreen opracowuje modele fizycznej degradacji wrażliwych obiektów dla szkła, metalu, ceramiki, wapienia, malowideł ściennych na tynku wapiennym i warstw farb w obrazach sztalugowych, które opisują.

Zespół badawczy IKiFP przygotował zestaw próbek zaprawy klejowo-kredowej – gesso – będącej jednym z najbardziej kruchych materiałów malarskich, w celu wykonania badań poszerzających wiedzę o parametrach mechanicznych na wysokie temperatury i poziomy wilgotności. Jest to ważne dla ochrony obiektów w ciepłych strefach klimatycznych. Zaprawę scharakteryzowano za pomocą dynamicznego analizatora mechanicznego i zastosowano zasadę superpozycji czasu i temperatury przy interpretacji wyników. Eksperymentalnie wyznaczone współczynniki przesunięcia poziomego aT użyto do znalezienia zależności pomiędzy temperaturą i czasem. Dopasowanie liniowe współczynników przesunięcia wykreślonych w funkcji temperatury przeprowadzono za pomocą równania Arrheniusa. Wyniki pokazują, że współczynniki przesunięcia zmierzone dla zaprawy są zgodne z równaniem Arrheniusa a energia aktywacji wynosi 88 ± 6 kJ/mol.

Ponadto zainicjowano kilka kampanii monitorowania mikrouszkodzeń spowodowanych klimatem w wybranych oryginalnych obiektach przechowywanych w warunkach rzeczywistych, aby zweryfikować wyniki prowadzonych obliczeń numerycznych. Wśród obiektów znajdują się karty pergaminowe z archiwum klasztoru Dominikanów w Krakowie (monitoring nieodwracalnego zwijania się pergaminu), drewniana rzeźba z Bazyliki Mariackiej w Krakowie wypożyczona na wystawę do Zamku Królewskiego na Wawelu w Krakowie (monitoring pęknięcia drewna techniką emisji akustycznej).

Kolejnym badanym materiałem jest niestabilne szkło. Wybrano dwa składy, reprezentatywne dla szkła historycznych, uznawanych za niestabilne ze względu na niską zawartość $\text{CaO} + \text{MgO}$ i wysoką zawartość tlenków alkalicznych. Próbkę poddano sztucznemu starzeniu przez kilka dni w temperaturze $80\text{ }^\circ\text{C}$ i wilgotności względnej (RH) 85%. Podczas spadku RH zastosowano technikę emisji akustycznej (AE), aby śledzić rozwój mikropęknięć. Pierwsze testy wykazały, że AE może być z powodzeniem stosowana do tego celu pomimo bardzo niskiej odporności na pęknięcie szkła. Testy będą kontynuowane w nadchodzącym roku w celu określenia krytycznych poziomów RH, przy których rozpoczyna się rozwój mikropęknięć.

Projekty akcji EU COST

1. Obliczeniowa chemia materiałowa dla wydajnego procesu rozkładu wody na nanokryształach zbudowanych z pierwiastków nieszlachetnych



EU COST Action nr 18234 „Computational materials sciences for efficient water splitting with nanocrystals from abundant elements” [2019-2023]

(koordynator krajowy: prof. dr hab. Małgorzata Witko)

Celem niniejszej akcji COST jest łączenie wiedzy dostarczanej dzięki stosowaniu różnych metod modelowania molekularnego (DFT, mechaniki i dynamiki molekularnej, dynamiki Monte-Carlo, modelowania mikrokinetycznego) i różnych pakietów obliczeniowych, ułatwiające modelowanie procesów towarzyszących rozkładowi wody i prowadzące w konsekwencji do opracowania nowych materiałów elektrokatalitycznych. W badaniach prowadzonych w IkiFP PAN prowadzone są obliczenia w ramach Teorii Funkcjonałów Gęstości, używając funkcyjonału PBE i baz funkcyjnych typu def2-TZVP.

W bieżącym roku zbadano możliwość wykorzystania V_2O_5 jako katalizatora w elektrokatalitycznej reakcji rozkładu wody. W tym celu skonstruowano dwuwarstwowy model klasterowy powierzchni (010) pięciotlenku wanadu o wzorze $V_{20}O_{62}H_{22}$. Klaster ten odzwierciedla strukturę reprezentowanej powierzchni, na której wyróżnić można trzy typy atomów tlenu (tzw. wanadyłowy, skoordynowany z pojedynczym atomem wanadu - O1, mostkowy, skoordynowany z dwoma wanadami - O2, oraz skoordynowany potrójnie z wanadami - O3) o różnej nukleofilowości. Ponieważ zakłada się, że reakcja rozkładu wody zachodzi na zdefektowanej powierzchni katalizatorów tlenkowych, skonstruowano modele klastra V_2O_5 z wakancjami tlenowymi zajmującymi miejsce różnych atomów tlenu (O1, O2, O3). Łatwość tworzenia pojedynczych wakancji tlenowych zmienia się w szeregu $O1 < O3 < O2$. W kolejnym kroku stwierdzono, że w przypadku tworzenia się par wakancji tlenowych, korzystniejsze jest powstawanie ugrupowań wakancji tego samego typu. Tworzeniu wakancji tlenowych towarzyszy zmiana właściwości pięciotlenku wanadu, który z półprzewodnika staje się układem o charakterze metalicznym (przerwa wzbroniona zmniejsza się o 96% - 100% w stosunku do układu bez defektów). Wakancje stanowią miejsca wiązania cząsteczek wody. H_2O ulega najsłabszemu wiązaniu w pozycji O1, zaś najsilniejszemu w pozycji O3. Stwierdzono również, że zarówno niezdefektowany V_2O_5 , jak i V_2O_5 z wprowadzonymi wakancjami tlenowymi, są w stanie adsorbować dysocjatywnie cząsteczkę H_2O . Dysocjatywna adsorpcja wody na powierzchni (010) jest możliwa w różnych konfiguracjach. Powstały z dysocjacji proton może tworzyć grupę OH z tlenem O1, O2 bądź O3, zaś powstała w wyniku dysocjacji grupa OH może przyłączyć się do wanadu posiadającego już grupę wanadyłową ($V=O$) tworząc ugrupowanie HO-V=O lub może adsorbować się na powierzchni wolnego V.

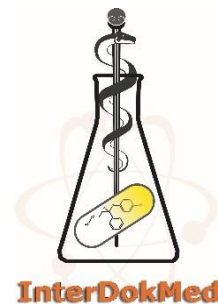
Wyniki obliczeń pokazały, że w pierwszym przypadku tworzą się ugrupowanie HO-V=O na powierzchni i grupa OH (z udziałem tlenu O3). Tak utworzona grupa OH skierowana jest w głąb klastera, między warstwy, co stanowi pierwszy etap w kierunku tworzenia brązów wanadowych. Gdy powstała w wyniku dysocjacji: grupa OH adsorbuje się na „gołym” wanadzie a H^+ na O1 bądź O3, odtwarza się woda, która fizysorbuje na powierzchni (odległość ponad 2.5 Å nad powierzchnią).

Projekty strukturalne funduszy Unii Europejskiej

1. Środowiskowe Studia Doktoranckie „Interdyscyplinarność dla medycyny innowacyjnej” (InterDokMed)

Projekt NCBR POWR.03.02.00-00.I013/16 [2017-2023]

(kierownik projektu: dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj, prof. IKiFP)



Celem projektu była realizacja interdyscyplinarnych rozpraw doktorskich, w tematyce umiejscowionej na pograniczu nauk ścisłych i nauk medycznych. Zaproponowany program studiów doktoranckich wpisujący się w nurt nowoczesnego kształcenia. Studia doktoranckie miały charakter środowiskowy, a dobór jednostek partnerskich, gwarantował wysoki poziom wypracowanego modelu kształcenia. Projekt realizowany był przez konsorcjum złożone z pięciu jednostek naukowych: koordynatorem projektu był Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN, partnerami zaś: Instytut Farmakologii im. Jerzego Maja PAN, Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego PAN, Wydział Chemii UJ i Wydział Lekarski UJ CM.

Interdyscyplinarność programu doktoranckiego została zapewniona poprzez: (1) realizowaną w jednostkach partnerskich tematykę badań naukowych, obejmującą więcej niż jedną dyscyplinę (nauki: chemiczne, fizyczne, medyczne, farmaceutyczne), (2) realizację rozpraw doktorskich pod opieką dwóch promotorów, reprezentujących różne dyscypliny i pochodzących z dwóch różnych jednostek partnerskich, przez co projekt stał się multidyscyplinarny, (3) obowiązkowe i wspólne dla wszystkich doktorantów seminaria, które były miejscem poszukiwania nowych, innowacyjnych rozwiązań metodologicznych, łączących i uzupełniających specjalistyczne metody badawcze z różnych dyscyplin nauki, przez co projekt stał się transdyscyplinarny, (4) rozwiązywanie zagadnień i stosowanie metod, narzędzi/obiektów badań, typowych dla jednej dziedziny w innych, przez co projekt miał cechy projektu cross-disciplinary. Projekt posiadał ponadto elementy umiędzynarodowienia. Doktoranci mieli możliwość wyjazdów na staże zagraniczne i możliwość współpracy z partnerami zagranicznymi.

Tematyka realizowanych w ramach Środowiskowych Studiów Doktoranckich (ŚSD) „Interdyscyplinarność dla medycyny innowacyjnej” rozpraw doktorskich, wpisująca się tematykę zagadnień kluczowych dla gospodarki i społeczeństwa, wspierających innowacyjność kraju i zapewniających możliwość transferu/komercjalizacji rezultatów studiów doktoranckich. Tematy realizowane na styku nauk ścisłych i medycznych skupiały się na poszukiwaniu nowych materiałów do zastosowań medycznych bądź farmakologicznych, badaniach mechanizmów działania już istniejących leków przy zastosowaniu nowoczesnych technik fizykochemicznych stosowanych w naukach ścisłych, poznanie potencjalnych molekularnych mechanizmów działania białek w procesach chorobowych. Podstawą tych prac były wzajemnie się uzupełniające badania modelowe jak i badania na zwierzętach doświadczalnych i w oparciu o materiał kliniczny, pobrany od pacjentów.

Finalnie 44 osoby obroniły rozprawę doktorską i uzyskały stopień doktora: 16 w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych dyscyplina nauki chemiczne, 9 w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych dyscyplina nauki fizyczne, 17 w dziedzinie nauki medyczne i nauki o zdrowiu dyscyplina nauki medyczne, 1 w dziedzinie nauki medyczne i nauki o zdrowiu dyscyplina nauki farmaceutyczne. 18 interdyscyplinarnych rozpraw doktorskich zostało wyróżnionych. W ramach projektu powstało 275 publikacji, 14 rozdziałów w książkach, 39 popularnonaukowych i publikacji pokonferencyjnych. Doktoranci byli współautorami 240 komunikatów konferencyjnych i 372 plakatów.

Projekt realizowany był w ramach Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój 2014-2020, działanie 3.2 Studia doktoranckie, Oś III Szkolnictwo wyższe dla gospodarki i rozwoju. Celem projektu było zwiększenie jakości i efektywności kształcenia na studiach doktoranckich.



Fundusze Europejskie
Wiedza Edukacja Rozwój

Unia Europejska
Europejski Fundusz Społeczny



2. Interdyscyplinarne Środowiskowe Studia Doktoranckie „Fizyczne, Chemiczne i Biofizyczne Podstawy Nowoczesnych Technologii i Inżynierii Materiałowej” (FCB)

Projekt NCBiR POWR.03.02.00-00-I004/16 [2017-2023]

(z-ca kierownika projektu: dr hab. inż. A. Micek-Ilnicka)

Z dniem 31 października 2023 roku zakończono realizację projektu FCB finansowanego ze środków Programu Operacyjnego Wiedza Edukacja Rozwój (POWER), przyznanego w wyniku konkursu ogłoszonego przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju (NCBiR) w 2017 r. na interdyscyplinarne programy studiów doktoranckich. Projekt był koordynowany przez Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej (WFiIS) Akademii Górniczo-Hutniczej (AGH) z udziałem partnerskim 4 instytucji: Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki (WIMiC) AGH, Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego (WCh UJ), Instytutu Fizyki Jądrowej (IFJ) im. Henryka Niewodniczańskiego PAN oraz Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni (IKiFP) im. Jerzego Habera PAN w Krakowie.

Studia doktoranckie FCB posiadały interdyscyplinarny charakter. Doktoranci reprezentowali jednostki prowadzące badania w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w tym w dyscyplinach takich jak nauki chemiczne, fizyczne oraz w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinach takich jak inżynieria materiałowa oraz inżynieria chemiczna.

Wszystkie, zadeklarowane w projekcie, wskaźniki zostały zrealizowane. Projekt przewidywał wykształcenie 75 doktorantów, w rozliczeniu końcowym 72 doktorantów ukończyło studia FCB. Pozostałe wskaźniki projektu takie jak kolejno: liczba zrealizowanych rozpraw doktorskich wyniosła 62 (na 60 rozpraw zaplanowanych) i liczba rozpraw doktorskich z dwoma promotorami wyniosła 40 (na 40 rozpraw zaplanowanych). W ramach projektu FCB 3 doktorantki z IKiFP zakończyły postępowania awansowe uzyskaniem stopnia doktora, co było zgodnie z założeniami projektu.

Dorobek naukowy doktorantek FCB z IKiFP, czyli wspomnianych trzech osób, obejmuje: 19 publikacji, 2 polskie zgłoszenia patentowe, 1 międzynarodowe zgłoszenie patentowe, 30 wystąpień ustnych i 21 posterów.



Unia Europejska
Europejski Fundusz Społeczny



Inne międzynarodowe projekty badawcze

1. Bioplastics upcycling loop (BioPolyCycle)

Projekt ANSO-CR-PP-2022-01

(kierownictwo projektu – dr hab. Maciej Guzik)

Badania wprowadzają innowacyjną metodę upcyklingu polegającą na przekształcaniu komercyjnych bioplastików, takich jak polilaktyd (PLA), polikaprolakton (PCL) i polihydroksyalkanoaty (PHA), w cenne surowce bogate w węgiel. Te surowce wykorzystuje się do biotechnologicznej produkcji biopolimerów, takich jak PHA i celuloza bakteryjna (BC). To podejście jest strategicznie zgodne z dziewięcioma Celami Zrównoważonego Rozwoju Organizacji Narodów Zjednoczonych, przyczyniając się do poprawy zdrowia, efektywnego zarządzania odpadami, czystej wody, sanitariatów i zrównoważonych praktyk przemysłowych.

Kluczowe aspekty metodyki obejmowały rozwój technik fermentacji z wykorzystaniem surowców bogatych w węgiel, skupiając się przede wszystkim na konwersji mikrobiologicznej do PHA. Początkowe eksperymenty w kolbach oceniały różne szczepy bakteryjne pod kątem produkcji biopolimerów PHA, identyfikując hydroksylowane kwasy tłuszczowe jako potencjalne substraty, pomimo ich łagodnej toksyczności. Opracowano specyficzne strategie karmienia pulsacyjnego dla tych związków. Kolejne fermentacje typu batch pozwoliły ustalić podstawowe parametry fermentacji, prowadząc do zoptymalizowanych strategii karmienia w celu zwiększenia gęstości komórkowej i zawartości PHA. Ekstrakcja polimerów PHA była przeprowadzana przy użyciu procesów rozpuszczalnikowych w różnych temperaturach.

Wstępne wyniki są obiecujące, demonstrując wykonalność produkcji polimerów PHA z różnymi szczepami bakteryjnymi i hydroksylowanymi kwasami tłuszczowymi jako substratami. Pomimo niewielkiej toksyczności substratów, opracowano skuteczne strategie karmienia pulsacyjnego. Te wstępne wyniki, uzyskane z początkowych fermentacji typu batch, dostarczają istotnych danych na potrzeby przyszłych badań i podkreślają potencjał tych substratów w generowaniu różnorodnych polimerów PHA.

Projekty programu Erasmus+

1. Projekt „Mobilność edukacyjna” dla studentów i pracowników



Program EU Erasmus+ [2014-2023]

(koordynator programu: dr Agata Pomorska)

W 2023 roku zrealizowano następujące edukacyjne wyjazdy:

a) doktorantów na praktykę:

- Amir Sultan – St Andrews University (Szkocja)
- Zofia Krasieńska-Krawet – University of Zagreb (Chorwacja)

b) pracowników na szkolenia:

- Andrzej Baliś – Laboratoire Charles Coulomb (Francja)
- Marcin Bury – Norwegian University of Science and Technology (Norwegia)
- Dymitry Kharytonau – Helmholtz- Zentrum Hereon (Niemcy)
- Marcel Krzan – Sofia University "St. Kliment Ohridski" (Bułgaria)
- Marcel Krzan – Institute of Condensed Matter Chemistry and Technologies for Energy, National Research Council (Włochy)
- Leszek Krzemień – Universität Erlangen-Nürnberg (Niemcy)
- Aneta Michna – Clausthal University of Technology (Niemcy)
- Aneta Michna – University of Ostrava (Czechy)
- Maria Morga – Clausthal University of Technology (Niemcy)
- Maria Morga – University of Ostrava (Czechy)
- Aleksandra Pacuła – Universidad de Cantabria (Hiszpania)
- Agata Pomorska – Clausthal University of Technology (Niemcy)
- Agata Pomorska – University of Ostrava (Czechy)
- Małgorzata Ruggiero – Institute of Chemical Engineering Sciences, FORTH/ICE-HT (Grecja)
- Konrad Skowron – Helmholtz- Zentrum Hereon (Niemcy)
- Mateusz Tataruch – Slovak University of Technology in Bratislava (Słowacja)

Efektem mobilności edukacyjnej było m.in. zebranie materiału badawczego do prac doktorskich, artykułów w czasopiśmie naukowych o międzynarodowym zasięgu i prezentacji konferencyjnych.

Projekt będzie kontynuowany w 2024 r.



Współfinansowane przez
Unię Europejską

Dorobek publikacyjny instytutu za rok 2023

PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM

MONOGRAFIA

1. I. I. Kurilo, D. S. Kharytonau, A. A. Kasach, A. R. Tsyganov "Inhibitor Protection from Corrosion of Magnesium-containing Aluminium Alloys", BSTU 2023 [246 p, ISBN: 978-985-897-136-6, In Russian] И. И. Курило, Д. С. Харитонов, А. А. Касач, А. Р. Цыганов "Ингибиторная защита от коррозии магнийсодержащих сплавов алюминия", БГТУ, Минск 2023. [246 с, ISBN: 978-985-897-136-6]

ROZDZIAŁ

1. Z. Adamczyk, M. Wasilewska, M. Morga, "Methods for Electrokinetic Surface Characterization", in "Surface-Functionalized Ceramics: For Biotechnological and Environmental Applications" (Laura Treccani, Fabian Meder, eds), Wiley-VCH GmbH, 2023, str. 193-258 [ISBN:9783527338351] DOI:10.1002/9783527698042.ch6
2. T. Kobiela, K. Wojciechowski, B. Jachimska "Probing bio interfaces with biophysical methods: aspects of applying the QCM-D method", Chapter, in book, Encyclopedia of Solid-Liquid Interfaces (K. Wandelt, G. Bussetti, eds.), Reference Collection in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering DOI: 10.1016/B978-0-323-85669-0.00076-3, Elsevier, 2023, str. 714-722 [ISBN 978-0-323-85670-6]
3. K. Nieszporek, T. Pańczyk "Adsorpcja czteroniciowego DNA na funkcjonalizowanym grafenie in: "NAUKA I PRZEMYSŁ metody spektroskopowe w praktyce nowe wyzwania i możliwości" (Z. Hubicki, ed.), Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Lublin 2023, str. 321-325, [ISBN 978-83-227-9700-6]
4. D. Rutkowska-Zbik, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko „Methane activation and transformation to ethylene on Mo-(oxy)carbide as a key step of CH₄ to aromatics”, str. 319-333, in: M. Musiał, I. Grabowski "Polish Quantum Chemistry from Kołos to Now" Adv. Quant. Chem. Book series, 2023, vol. 87, Elsevier, DOI: 10.1016/bs.aiq.2023.01.008.
5. O. Sachuk, V. Zazhigalov, P. Dulian, D. Rutkowska-Zbik, O. Kiziun, M. Kurmach, L. Kotynska, V. Starchevskyy, S. Shcherbakov "The Study of Properties of Mechanochemical and Ultrasonic Treated BaO/ZrO₂ Composites", in: Nanomaterials and Nanocomposites, Nanostructure Surfaces, and Their Applications (O. Fesenko, L. Yatsenko, eds.) Springer Proceedings in Physics, 279 (2023) 217-228, DOI: 10.1007/978-3-031-18096-5_11
6. D. Stopar, W. Płaziński, J.R. Porras-Dominguez, I. Dogsa "Macromolecular properties of fructans" in: "The Book of Fructans", (W. Van den Ende, E. Toksoy Oner, Eds.) [ISBN: 9780323854108], Academic Press 2023, str. 25-46, DOI: 10.1016/B978-0-323-85410-8.00005-3

ROZDZIAŁY WYDANE PRZEZ WYDAWNICTWA SPOZA LISTY MEiN

1. S. Simon, L. Bratasz "How little is enough – Key Performance Indicators for Energy Consumption and Climate in Memory Institutions", Chapter in: Arbeitshefte des Brandenburgischen Landesamtes für Denkmalpflege und Archäologischen Landesmuseums, Nr. 66 (2023) (E. Egel, A. Furche, M. Noll-Minor, eds.) Michael Imhof Verlag GmbH & Co. KG, 2023 str. 103-110 [ISBN 978-3-7319-1356-6]

PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY JOURNAL CITATION REPORTS

1. Z. Adamczyk, M. Sadowska, M. Nattich-Rak "Quantifying Nanoparticle Layer Topography: Theoretical Modeling and Atomic Force Microscopy Investigations", *Langmuir*, 39(42) (2023) 15067-15077, DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c02024
2. H.G. Ali, K. Khan, M.B. Hanif, M.Z. Khan, I. Hussain, M.S. Javed M.S., H.A.Z. AL-bonsrulah, M. Mosiałek, M. Fichtner, M. Motola "Advancements in two-dimensional materials as anodes for lithium-ion batteries: Exploring composition-structure-property relationships emerging trends, and future perspective", *Journal of Energy Storage*, 73 (2023) 108980, DOI: 10.1016/j.est.2023.108980
3. J. Andrys-Olek, J. Heider, T. Borowski "Molecular Dynamics Simulations for the Michaelis Complex of Ectoine Synthase (EctC)", *Catalysts*, 13(1) (2023) 124, DOI: 10.3390/catal13010124
4. J. Andrys-Olek, B.C. Selvanesan, S. Varghese, R.H. Arriaza, P.B. Tiwari, M. Chruszcz, T. Borowski, G. Upadhyay, "Experimental and Computational Studies Reveal Novel Interaction of Lymphocytes Antigen 6K to TGF- β Receptor Complex", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(16) (2023) 12779, DOI: 10.3390/ijms241612779
5. R.H. Arriaza, B. Abiskaroon, M. Patel, L. Daneshian, A. Kluza, S. Snoeck, M.B. Watkins, J.B. Hopkins, T. Van Leeuwen, M. Grbic, V. Grbic, T. Borowski, M. Chruszcz "Structural and functional studies reveal the molecular basis of substrate promiscuity of a glycosyltransferase originating from a major agricultural pest", *Journal of Biological Chemistry*, 299(12) (2023) 105421, DOI: 10.1016/j.jbc.2023.105421
6. S. Baumgart, D. Kupczyk, A. Archęła, O. Koszła, P. Sołek, W. Płaziński, A. Płazińska, R. Studzińska "Synthesis of Novel 2-(Cyclopentylamino)thiazol-4(5H)-one Derivatives with Potential Anticancer, Antioxidant, and 11 β -HSD Inhibitory Activities", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(8) (2023) 7252, DOI: 10.3390/ijms24087252
7. J. Bławdziewicz, Z. Adamczyk, M.L. Ekiel-Jeżewska "Streaming Current for Surfaces Covered by Square and Hexagonal Monolayers of Spherical Particles", *ACS Omega*, 8(47) (2023) 44717-44723, DOI: 10.1021/acsomega.3c05603
8. B. Blyzniuk, A. Dziwoki, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, E. Madej, E. Młyńczak, M. Szpytma, D. Wilgocka-Ślezak, J. Korecki, N. Spiridis "Magnetization reversal in Fe(001) films grown by magnetic field assisted molecular beam epitaxy", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 586 (2023) 171151, DOI: 10.1016/j.jmmm.2023.171151
9. N.V. Bogomazova, D.S. Kharytonau, I.M. Zharskii, R.P. Socha "Photovoltaic ZnO/SnS_x heterostructures obtained by "electrochemical deposition-successive ionic layer adsorption and reaction" approach", *Applied Physics A: Materials Science and Processing*, 129(12) (2023) 821, DOI: 10.1007/s00339-023-07108-9
10. M. Borkowski, P. Batys, O.M. Demchuk, P.B. Kowalczyk, J. Zawęła "Amino-Acids Surfactants and n-Octanol Mixtures—Sustainable, Efficient, and Dynamically Triggered Foaming Systems", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 62(34) (2023) 13498–13509, DOI: 10.1021/acs.iecr.3c01972
11. A. Brzyska, S. Majewski, Ł. Ponikiewski, M. Zubik-Duda, A. Lipke, A. Gładysz-Płaska, S. Sowa "Benzophosphol-3-yl Triflates as Precursors of 1,3-Diarylbenzophosphole Oxides", *Journal of Organic Chemistry*, 88(13) (2023) 7901-7917, DOI: 10.1021/acs.joc.2c02355

12. J. Chwastowski, M. Guzik, S. Bednarz, P. Staroń "Upcycling Waste Streams from a Biorefinery Process—A Case Study on Cadmium and Lead Biosorption by Two Types of Biopolymer Post-Extraction Biomass", *Molecules*, 28(17) (2023) 6345, DOI: 10.3390/molecules28176345
13. M. Dąbkowska, I. Stukan, B. Kowalski, W. Donerowicz, M. Wasilewska, A. Szatanik, M. Stańczyk-Dunaj, A. Michna "BDNF-loaded PDADMAC-heparin multilayers: a novel approach for neuroblastoma cell study", *Scientific Reports*, 13 (2023) 17939, DOI: 10.1038/s41598-023-45045-y
14. P. Deptuła, K. Fiedoruk, M. Wasilewska, Ł. Suprewicz, M. Cieśluk, P. Żeliszewska, M. Oćwieja, Z. Adamczyk, K. Pogoda, R. Bucki "Physicochemical Nature of SARS-CoV-2 Spike Protein Binding to Human Vimentin", *ACS Applied Materials and Interfaces*, 15(28) (2023) 34172-34180, DOI: 10.1021/acsami.3c03347
15. B. Donarska, A. Sławińska-Brych, M. Mizerska-Kowalska, B. Zdzisińska, W. Płaziński, K.Z. Łączkowski "Thalidomide derivatives as nanomolar human neutrophil elastase inhibitors: Rational design, synthesis, antiproliferative activity and mechanism of action", *Bioorganic Chemistry*, 138 (2023) 106608, DOI: 10.1016/j.bioorg.2023.106608
16. B. Donarska, M. Świtalska, J. Wietrzyk, W. Płaziński, K.Z. Łączkowski "Spectrofluorimetric and Computational Investigation of New Phthalimide Derivatives towards Human Neutrophil Elastase Inhibition and Antiproliferative Activity", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(1) (2023) 110, DOI: 10.3390/ijms24010110
17. A. Dziwoki, B. Blyzniuk, K. Freindl, E. Madej, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, N. Spiridis "Magnetic-Field-Assisted Molecular Beam Epitaxy: Engineering of Fe₃O₄ Ultrathin Films on MgO(111)", *Materials*, 16(4) (2023) 1485, DOI: 10.3390/ma16041485
18. M. Gackowski, A. Selent, I. Ainasoja, M. Mazur, M. Hunger, J. Datka, V.-V. Telkki "Cleansing effect during the TBAOH treatment of ultra-stable zeolite Y", *Microporous and Mesoporous Materials*, 359 (2023) 112626, DOI: 10.1016/j.micromeso.2023.112626
19. S. Gautam, L. Lapcik, B. Lapcikova, D. Repka, L. Szyk-Warszyńska "Physicochemical Characterisation of Polysaccharide Films with Embedded Bioactive Substances", *Foods*, 12(24) (2023) 4454, DOI: 10.3390/foods12244454
20. M.B. Hanif, S. Rauf, Z.U. Abadeen, K. Khan, Z. Tayyab, S. Qayyum, M. Mosiałek, Z. Shao, C.-X. Li, M. Motola "Proton-conducting solid oxide electrolysis cells: Relationship of composition-structure-property, their challenges, and prospects", *Matter*, 6(6) (2023) 1782-1830, DOI: 10.1016/j.matt.2023.04.013
21. M.B. Hanif, S. Rauf, M. Mosiałek, K. Khan, V. Kavaliukè, A. Kežionis, T. Šalkus, J. Gurgul, D. Medvedev, M. Zimowska, D. Madej, M. Motola "Mo-doped BaCe_{0.9}Y_{0.1}O_{3-δ} proton-conducting electrolyte at intermediate temperature SOFCs. Part I: Microstructure and electrochemical properties", *International Journal of Hydrogen Energy*, 48(96) (2023) 37532-37549, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2023.01.144
22. A.L. Harmat, M. Morga, J.L. Lutkenhaus, P. Batys, M. Sammalkorpi "Molecular mechanisms of pH-tunable stability and surface coverage of polypeptide films", *Applied Surface Science*, 615 (2023) 156331, DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.156331
23. R. Hernandez Arriaza, B. Abiskaroon, M. Patel, L. Daneshian, A. Kluza, S. Snoeck, M.B. Watkins, J.B. Hopkins, T. Van Leeuwen, M. Grbic, V. Grbic, T. Borowski, M. Chruszcz "Structural and functional studies reveal the molecular basis of substrate promiscuity of a glycosyltransferase originating from a major agricultural pest", *Journal of Biological Chemistry*, 299(12) (2023) 105421, DOI: 10.1016/j.jbc.2023.105421

24. A. Hovhannisyan, M. Janik, L. Woszczak, G. Khachatryan, M. Krystyjan, A. Lenart-Boroń, K. Stankiewicz, N. Czernecka, D. Duraczyńska, Z. Oszczyda, K. Khachatryan "The Preparation of Silver and Gold Nanoparticles in Hyaluronic Acid and the Influence of Low-Pressure Plasma Treatment on Their Physicochemical and Microbiological Properties", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(24) (2023) 17285, DOI: 10.3390/ijms242417285
25. E. Högfors-Rönholm, P. Stén, S. Christel, S. Fröjdö, T. Lillhonga, P. Nowak, P. Österholm, M. Dopson, S. Engblom "Targeting oxidation sites on boreal acid sulfate soil macropore surfaces mitigates acid and metal release to recipient water streams", *Applied Geochemistry*, 158 (2023) 105779, DOI: 10.1016/j.apgeochem.2023.105779
26. M. Irshad, K. Baber, M.S. butt, M.B. Hanif, M. Asad, A. Ghaffar, M. Rafique, I. Hussain, M.M. Al-Anazy, H. Makarov, B.D. Napruszewska, M. Mosiałek, M. Motola "Synergistic role of Biomolecules and Bio-chelating agents in the sustainable development of an efficient BaCe_{0.97}M_{0.03}O_{3-δ} (M = Sm, Gd) perovskite electrolyte for IT-SOFC", *Ceramics International*, 49(23) (2023) 38360-38366, DOI: 10.1016/j.ceramint.2023.09.170
27. W. Janus, T. Ślęzak, M. Ślęzak, M. Szpytma, P. Drózdź, H. Nayyef, A. Mandziak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, M. Jugovac, T.O. Menteş, A. Locatelli, A. Kozioł-Rachwał "Tunable magnetic anisotropy of antiferromagnetic NiO in (Fe)/NiO/MgO/Cr/MgO(001) epitaxial multilayers", *Scientific Reports*, 13(1) (2023) 4824, DOI: 10.1038/s41598-023-31930-z
28. P.J. Jodłowski, K. Dymek, G. Kurowski, K. Hyjek, A. Boguszevska-Czubara, B. Budzyńska, A. Pajdak, Ł. Kuterasiński, W. Piskorz, P. Jeleń, M. Sitarz "In vivo and in vitro studies of efficient mephedrone adsorption over zirconium-based metal-organic frameworks corroborated by DFT+D modeling", *Microporous and Mesoporous Materials*, 359 (2023) 112626, DOI: 10.1016/j.micromeso.2023.112647
29. P. Kalimuthu, D. Hege, A. Winiarska, Y. Gemmecker, M. Szaleniec, J. Heider, P.V. Bernhardt "Electrocatalytic Aldehyde Oxidation by a Tungsten Dependent Aldehyde Oxidoreductase from *Aromatoleum Aromaticum*", *Chemistry - A European Journal*, 29(20) (2023) e202203072, DOI: 10.1002/chem.202203072
30. K. Kamińska, K. Godakumara, B. Świdarska, A. Malinowska, G. Midekessa, K. Sofińska, J. Barbasz, A. Fazeli, M. Grzesiak "Characteristics of size-exclusion chromatography enriched porcine follicular fluid extracellular vesicles", *Theriogenology*, 205 (2023) 79-86, DOI: 10.1016/j.theriogenology.2023.04.010
31. B. Kaproń, A. Płazińska, W. Płaziński, T. Plech "Identification of the first-in-class dual inhibitors of human DNA topoisomerase II α and indoleamine-2,3-dioxygenase 1 (IDO 1) with strong anticancer properties", *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 38(1) (2023) 192-202, DOI: 10.1080/14756366.2022.2140420
32. T. Kastinen, D. Lupa, P. Bonarek, D. Fedorov, M. Morga, M.B. Linder, J.L. Lutkenhaus, P. Batys, M. Sammalkorpi "pH dependence of the assembly mechanism and properties of poly(l-lysine) and poly(l-glutamic acid) complexes", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 25(27) (2023) 18182-18196, DOI: 10.1039/d3cp01421e
33. G. Khachatryan, K. Khachatryan, M. Krystyjan, L. Krzemińska-Fiedorowicz, A. Lenart-Boroń, A. Białocka, M. Krupka, M. Krzan, K. Blaszyńska, M. Hanula, L. Juszczak "Synthesis and Investigation of Physicochemical and Biological Properties of Films Containing Encapsulated Propolis in Hyaluronic Matrix", *Polymers*, 15(5) (2023) 1271, DOI: 10.3390/polym15051271

34. G. Khachatryan, K. Khachatryan, J. Szczepankowska, M. Krzan, M. Krystyjan "Design of Carbon Nanocomposites Based on Sodium Alginate/Chitosan Reinforced with Graphene Oxide and Carbon Nanotubes", *Polymers* 15(4) (2023) 925, DOI: 10.3390/polym15040925
35. K. Khan, Z.D.D. Babar, S. Qayyum, M. Bilal Hanif, S. Rauf, A. Sultan, M. Mosiałek, M. Motola, B. Lin "Design of efficient and durable symmetrical protonic ceramic fuel cells at intermediate temperatures via B-site doping of Ni in $\text{BaCe}_{0.56}\text{Zr}_{0.2}\text{Ni}_{0.04}\text{Y}_{0.2}\text{O}_{3-\delta}$ ", *Ceramics International*, 49(11) (2023) 16826-16835, DOI: 10.1016/j.ceramint.2023.02.043
36. K. Khivantsev, M.A. Derewinski, J. Szanyi "Novel and emerging concepts related to cationic species in zeolites: Characterization, chemistry and catalysis", *Microporous and Mesoporous Materials*, 358 (2023) 112378, DOI: 10.1016/j.micromeso.2022.112378
37. K. Kołczyk-Siedlecka, R.P. Socha, X. Yang, K. Eckert, M. Wojnicki "Study on kinetics and mechanism of Re(VII) ion adsorption and desorption using commercially available activated carbon and solutions containing Se(VI) as an impurity", *Hydrometallurgy*, 215 (2023) 105973, DOI: 10.1016/j.hydromet.2022.105973
38. A. Komenda, M. Wojnicki, D. Kharytonau, G. Mordarski, E. Csapó, R.P. Socha "Deposition of Thin Electroconductive Layers of Tin (II) Sulfide on the Copper Surface Using the Hydrometallurgical Method: Electrical and Optical Studies", *Materials*, 16(14) (2023) 5019, DOI: 10.3390/ma16145019
39. A. Kornas, E. Tabor, D.K. Wierzbicki, J.E. Olszowka, R. Pilar, J. Dedeczek, M. Śliwa, H. Jirglova, S. Sklenak, D. Rutkowska-Zbik, K. Mlekodaj "Activation of molecular oxygen over binuclear iron centers in Al-rich *BEA zeolite", *Applied Catalysis B: Environmental*, 336 (2023) 122915, DOI: 10.1016/j.apcatb.2023.122915
40. D. Kosior, A. Wiertel-Pochopien, P. B. Kowalczyk, J. Zawala "Bubble Formation and Motion in Liquids—A Review", *Minerals*, 13(9) (2023) 1130, DOI: 10.3390/min13091130
41. D. Kozień, P. Żeliszewska, B. Szermer-Olearnik, Z. Adameczyk, A. Wróblewska, A. Szczygieł, K. Węgierek-Ciura, J. Mierzejewska, E. Pajtasz-Piasecka, T. Tokarski, G. Cios, S. Cudziło, Z. Pędzich "Synthesis and Characterization of Boron Carbide Nanoparticles as Potential Boron-Rich Therapeutic Carriers", *Materials*, 16(19) (2023) 6534, DOI: 10.3390/ma16196534
42. S. Krysiak, M. Gotić, E. Madej, A.C. Moreno Maldonado, G.F. Goya, N. Spiridis, K. Burda "The effect of ultrafine WO_3 nanoparticles on the organization of thylakoids enriched in photosystem II and energy transfer in photosystem II complexes", *Microscopy Research and Technique*, 86 (2023) 1583-1598, DOI: 10.1002/jemt.24394
43. M. Krzan, P. Chattopadhyay, S. Orvalho, M. Zednikova "Effects of N-Alkanol Adsorption on Bubble Acceleration and Local Velocities in Solutions of the Homologous Series from Ethanol to N-Decanol", *Materials*, 16(5) (2023) 2125, DOI: 10.3390/ma16052125
44. L. Krzemien, M. Giergiel, A. Kurek, J. Barbasz "The role of the cortex in indentation experiments of animal cells", *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, 22(1) (2023) 177-187, DOI: 10.1007/s10237-022-01639-5
45. K. Kubiński, K. Górka, M. Janeczko, A. Martyna, M. Kwaśnik, M. Masłyk, E. Zięba, J. Kowalczyk, P. Kuśtrowski, M. Borkowski, A. Boguszewska-Czubara, A. Klimeczek, O.M. Demchuk "Silver Is Not Equal to Silver: Synthesis and Evaluation of Silver Nanoparticles with Low Biological Activity, and Their Incorporation into C12Alanine-Based Hydrogel", *Molecules*, 28(3) (2023) 1194, DOI: 10.3390/molecules28031194

46. J. Kuczek, M. Szumera, D. Rutkowska-Zbik, M. Gackowski, J. Sułowska "Thermal and spectroscopic behavior of glasses from $P_2O_5-SiO_2-K_2O-MgO-CaO-Co_2O_3$ system", *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 148(4) (2023) 1435-1444, DOI: 10.1007/s10973-022-11362-z
47. P. Kulawik, E. Jamróz, T. Kruk, A. Szymkowiak, J. Tkaczewska, P. Krzyściak, M. Skóra, P. Guzik, M. Janik, T. Vlčko, V. Milosavljević "Active edible multi-layer chitosan/furcellaran micro/nanoemulsions with plant essential oils and antimicrobial peptides: Biological properties and consumer acceptance", *Food Control*, 150 (2023) 109767, DOI: 10.1016/j.foodcont.2023.109767
48. P. Kwiatkowski, M. Kurzawski, W. Kukula-Koch, A. Pruss, M. Sienkiewicz, W. Płaziński, B. Dołęgowska, I. Wojciechowska-Koszko "Staphyloxanthin inhibitory potential of trans-anethole: A preliminary study", *Biomedicine and Pharmacotherapy*, 158 (2023) 114153, DOI: 10.1016/j.biopha.2022.114153
49. P. Kwiatkowski, A. Tabiś, P. Sobolewski, W. Płaziński, A. Pruss, M. Sienkiewicz, B. Dołęgowska, I. Wojciechowska-Koszko "Enhancement of neutrophil chemotaxis by trans-anethole-treated *Staphylococcus aureus* strains", *PloS one*, 18(4) (2023) e0284042, DOI: 10.1371/journal.pone.0284042
50. E. Lalik, S.F. Parker, G. Irvine, I. da Silva, M.J. Gutmann, G. Romanelli, K. Drużbicki, R. Kosydar, M. Krzystyniak "Hydrogen Spillover in Tungsten Oxide Bronzes as Observed by Broadband Neutron Spectroscopy", *Energies*, 16(14) (2023) 5496, DOI: 10.3390/en16145496
51. Ł. Lamch, W. Szczęsna, S.J. Balicki, M. Bartman, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, K.A. Wilk "Multiheaded Cationic Surfactants with Dedicated Functionalities: Design, Synthetic Strategies, Self-Assembly and Performance", *Molecules*, 28(15) (2023) 5806, DOI: 10.3390/molecules28155806
52. M. Laskowska, A. Karczmarzka, M. Schabikowski, M. Adamek, A. Maximenko, K. Pawlik, O. Kowalska, Z. Olejniczak, Ł. Laskowski "Synthetic Opals or Versatile Nanotools—A One-Step Synthesis of Uniform Spherical Silica Particles", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(18) (2023) 13693, DOI: 10.3390/ijms241813693
53. K.J. Legawiec, M. Kruszelnicki, M. Zawadzka, P. Basařová, J. Zawała, I. Polowczyk, "Towards green flotation: Investigating the effect of rhamnolipid biosurfactant on single bubble adhesion dynamics", *Journal of Molecular Liquids*, 388 (2023) 122759, DOI: 10.1016/j.molliq.2023.122759
54. M. Leśkiewicz, K. Kamińska, E. Trojan, M. Procner, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, W. Lasoń, A. Basta-Kaim "Effects of ebselen, edaravone and theranostic nanocarriers on the oxygen glucose deprivation-induced cell damage: a study in organotypic hippocampal cultures", *IBRO Neuroscience Reports*, 15 (2023) S183, DOI: 10.1016/j.ibneur.2023.08.274
55. H. Li, S.M. Lalwani, C.I. Eneh, T. Braide, P. Batys, M. Sammakorpi, J.L. Lutkenhaus "A Perspective on the Glass Transition and the Dynamics of Polyelectrolyte Multilayers and Complexes", *Langmuir*, 39(42) (2023) 14823-14839, DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c00974
56. M. Maciag, W. Plazinski, W. Pulawski, M. Kolinski, K. Jozwiak, A. Plazinska "A comprehensive pharmacological analysis of fenoterol and its derivatives to unravel the role of β_2 -adrenergic receptor in zebrafish", *Biomedicine and Pharmacotherapy*, 160 (2023) 114355, DOI: 10.1016/j.biopha.2023.114355

57. E. Matras, A. Gorczyca, E. Pociecha, S.W. Przemieniecki, P. Żeliszewska, M. Oćwieja "Silver nanoparticles affect wheat (*Triticum aestivum* L.) germination, seedling blight and yield", *Functional Plant Biology*, 50(5) (2023) 390-406, DOI: 10.1071/FP22086
58. R. Meenambal, T. Kruk, J. Gurgul, P. Warszyński, D. Jantas "Neuroprotective effects of polyacrylic acid (PAA) conjugated cerium oxide against oxidative stress-induced SH-SY5Y cell damage", *Scientific Reports* 13 (2023) 18534, DOI: 10.1038/s41598-023-45318-6
59. A. Michalik, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska, A. Walczyk, E.M. Serwicka "Composites of Montmorillonite and Titania Nanoparticles Prepared by Inverse Microemulsion Method: Physico-Chemical Characterization", *Nanomaterials*, 13(4) (2023) 686, DOI: 10.3390/nano13040686
60. A. Michna, A. Pomorska, O. Ozcan "Biocompatible Macroion/Growth Factor Assemblies for Medical Applications", *Biomolecules*, 13(4) (2023) 609, DOI: 10.3390/biom13040609
61. A. Mitrović, J. Milovanović, J. Gurgul, A. Žekić, J. Nikodinović-Runić, V. Maslak "Enzymatic functionalization of liquid phase exfoliated graphene using horseradish peroxidase and laccase", *Enzyme and Microbial Technology*, 170 (2023) 110293, DOI: 10.1016/j.enzmictec.2023.110293
62. M. Mosiałek, M.B. Hanif, T. Šalkus, A. Kežionis, E. Kazakevičius, A. Feliksas Orliukas, R.P. Socha, W. Łasocha, M. Dziubaniuk, J. Wyrwa, M. Gregor, M. Motola "Synthesis of Yb and Sc stabilized zirconia electrolyte ($\text{Yb}_{0.12}\text{Sc}_{0.08}\text{Zr}_{0.8}\text{O}_{2-\delta}$) for intermediate temperature SOFCs: Microstructural and electrical properties", *Ceramics International*, 49(10) (2023) 15276-15283, DOI: 10.1016/j.ceramint.2023.01.111
63. S. Orlyk, P. Kyriienko, A. Kapran, V. Chedryk, D. Balakin, J. Gurgul, M. Zimowska, Y. Millot, S. Dzwigaj "CO₂-Assisted Dehydrogenation of Propane to Propene over Zn-BEA Zeolites: Impact of Acid-Base Characteristics on Catalytic Performance", *Catalysts*, 13(4) (2023) 681, DOI: 10.3390/catal13040681
64. M.A. Osipenko, J. Karczewski, M. Dominow, M. Prześniak-Welenc, I.V. Makarava, I. Kurilo, D.S. Kharytonau, J. Ryl "Multisine impedimetric monitoring with an in-depth distribution of relaxation times analysis of WE43 and AZ31 magnesium alloys corrosion", *Measurement*, 222 (2023) 113683, DOI: 10.1016/j.measurement.2023.113683
65. M.A. Osipenko, A.A. Kasach, J. Adamiec, M. Zimowska, I.I. Kurilo, D.S. Kharytonau "Corrosion inhibition of magnesium alloy AZ31 in chloride-containing solutions by aqueous permanganate", *Journal of Solid State Electrochemistry*, 27(7) (2023) 1847-1860, DOI: 10.1007/s10008-023-05472-3
66. M. Oszajca, A. Jodłowska, D. Rutkowska-Zbik, K. Kieca, G. Stochel "Unraveling the Molecular Mechanism of S-Nitrosation Mediated by N-Acetylmicroperoxidase-11", *Inorganic Chemistry*, 62(14) (2023) 5630-5643, DOI: 10.1021/acs.inorgchem.3c00180
67. M. Oszajca, W. Nitek, A. Rafalska-Łasocha, K. Pamin, J. Połtowicz, W. Łasocha "Synthesis, crystal structure and selected properties of three new 4-propylanilinium polyoxomolybdates", *Journal of Molecular Structure*, 1273 (2023) 134292, DOI: 10.1016/j.molstruc.2022.134292
68. A. Pajor-Świerzy, K. Kozak, D. Duraczyńska, A. Wiertel-Pochopień, J. Zawala, K. Szczepanowicz "Silver Shell Thickness-Dependent Conductivity of Coatings Based on Ni@Ag Core@shell Nanoparticles", *Nanotechnology, Science and Applications*, 16 (2023) 73-84, DOI: 10.2147/NSA.S435432

69. A. Pajor-Świerzy, L. Szyk-Warszyńska, D. Duraczyńska, K. Szczepanowicz "UV-Vis Sintering Process for Fabrication of Conductive Coatings Based on Ni-Ag Core-Shell Nanoparticles", *Materials*, 16(22) (2023) 7218, DOI: 10.3390/ma16227218
70. T. Panczyk, K. Nieszporek "Formation of degraded LDPE surfaces using mechanical cleavage and shock compression analyzed by means of molecular dynamics simulations", *Computational Materials Science*, 230 (2023) 112522, DOI: 10.1016/j.commatsci.2023.112522
71. T. Panczyk, W. Plazinski, F.-Y. Dupradeau, A. Brzyska, P. Wolski "Interaction of Chondroitin and Hyaluronan Glycosaminoglycans with Surfaces of Carboxylated Carbon Nanotubes Studied Using Molecular Dynamics Simulations", *Molecules*, 28(2) (2023) 826, DOI: 10.3390/molecules28020826
72. B. Pantelic, S. Skaro Bogojevic, D. Milivojevic, T. Ilic-Tomic, B. Lončarević, V. Beskoski, V. Maslak, M. Guzik, K. Makryniotis, G. Taxeidis, R. Siaperas, E. Topakas, J. Nikodinovic-Runic "Set of Small Molecule Polyurethane (PU) Model Substrates: Ecotoxicity Evaluation and Identification of PU Degrading Biocatalysts", *Catalysts*, 13(2) (2023) 278, DOI: 10.3390/catal13020278
73. P. Pańtak, J.P. Czechowska, E. Cichoń, A. Zima "Novel Double Hybrid-Type Bone Cements Based on Calcium Phosphates, Chitosan and Citrus Pectin", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(17) (2023) 13455, DOI: 10.3390/ijms241713455
74. O.O. Pariiska, D.O. Mazur, V.M. Asaula, V.V. Buryanov, R. Socha, Y.I. Kurys, S.V. Kolotilov, V.G. Koshechko, V.D. Pokhodenko "Influence of the Structure of Nanocomposites Based on Co,N,S-Doped Carbon and Co9S8 on the Catalytic Properties in the Processes of Quinoline and Its Methyl Derivatives Hydrogenation", *Theoretical and Experimental Chemistry*, 58 (2023) 417–426, DOI: 10.1007/s11237-023-09757-6
75. N. Piergies, J. Mathurin, A. Dazzi, A. Deniset-Besseau, M. Oćwieja, C. Paluszkiwicz, W.M. Kwiatek "IR nanospectroscopy to decipher drug/metal nanoparticle interactions: Towards a better understanding of the spectral signal enhancement and its distribution", *Applied Surface Science*, 609 (2023) 155217, DOI: 10.1016/j.apsusc.2022.155217
76. N. Piergies, M. Oćwieja, J. Maciejewska-Prończuk, R. Kosydar, C. Paluszkiwicz, W.M. Kwiatek "Quantitative and qualitative analyses of drug adsorption on silver nanoparticle monolayers: QCM, SERS, and TEIRA nanospectroscopy studies", *Nanoscale*, 15(27) (2023) 11693–11706, DOI: 10.1039/d3nr01218b
77. W. Plazinski, T. Angles d'Ortoli, G. Widmalm "Conformational flexibility of the disaccharide β -1-Fucp-(1 \rightarrow 4)- α -d-Glcp-OMe as deduced from NMR spectroscopy experiments and computer simulations", *Organic and Biomolecular Chemistry*, 21(34) (2023) 6979–6994, DOI: 10.1039/d3ob01153d
78. J. Podobiński, M. Zimowska, K. Samson, M. Śliwa, J. Datka "Ethoxy Groups on ZrO₂, CuO, CuO/ZrO₂, Al₂O₃, Ga₂O₃, SiO₂ and NiO: Formation and Reactivity", *Molecules*, 28(8) (2023) 3463, DOI: 10.3390/molecules28083463
79. J. Podobiński, M. Zimowska, M. Śliwa, J. Datka "IR Studies of Ethoxy Groups on CeO₂", *Molecules*, 28(3) (2023) 1251, DOI: 10.3390/molecules28031251
80. D. Porębska, Ł. Orzeł, D. Rutkowska-Żbik, G. Stochel, R. van Eldik "Synthesis and characterization of cyanocobalamin conjugates with Pt(II) complexes towards potential therapeutic applications", *Polyhedron*, 230 (2023) 116230, DOI: 10.1016/j.poly.2022.116230

81. R. Prakash, D.W. Goodlett, S. Varghese, J. Andrys, F.A. Gbadamosi, R.H. Arriaza, M. Patel, P.B. Tiwari, T. Borowski, M. Chruszcz, L.S. Shimizu, G. Upadhyay "Development of fluorophore labeled or biotinylated anticancer small molecule NSC243928", *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, 79 (2023) 117171, DOI: 10.1016/j.bmc.2023.117171
82. S.W. Przemieniecki, M. Borsuk-Stanulewicz, C. Purwin, O. Kosewska, M. Oćwieja "The Effect of Different Forms of Titanium Dioxide on the Yield, Chemical and Microbiological Parameters of Perennial Ryegrass (*Lolium perenne* L.) Herbage and Silage", *Agriculture (Switzerland)*, 13(8) (2023) 1588, DOI: 10.3390/agriculture13081588
83. Z. Sárkány, F. Rocha, A. Bratek-Skicki, P. Tompa, S. Macedo-Ribeiro, P.M. Martins "Quantification of Surface Tension Effects and Nucleation-and-Growth Rates during Self-Assembly of Biological Condensates", *Advanced Science*, 10(23) (2023) 2301501, DOI: 10.1002/advs.202301501
84. B.C. Selvanesan, S. Varghese, J. Andrys-Olek, R.H. Arriaza, R. Prakash, P.B. Tiwari, D. Hupalo, Y. Gusev, M.N. Patel, S. Contente, M. Sanda, A. Uren, M.D. Wilkerson, C.L. Dalgard, L.S. Shimizu, M. Chruszcz, T. Borowski, G. Upadhyay "Lymphocyte antigen 6K signaling to aurora kinase promotes advancement of the cell cycle and the growth of cancer cells, which is inhibited by LY6K-NSC243928 interaction", *Cancer Letters*, 558 (2023) 216094, DOI: 10.1016/j.canlet.2023.216094
85. M.S. Shakeri, Z. Swiatkowska-Warkocka, O. Polit, T. Itina, A. Maximenko, J. Depciuch, J. Gurgul, M. Mitura-Nowak, M. Perzanowski, A. Dziedzic, J. Nęcki "Alternative local melting-solidification of suspended nanoparticles for heterostructure formation enabled by pulsed laser irradiation", *Advanced Functional Materials* 33 (2023) 2304359, DOI: 10.1002/adfm.202304359
86. S. Skibiński, J.P. Czechowska, M. Guzik, V. Vivcharenko, A. Przekora, P. Szymczak, A. Zima "Scaffolds based on β tricalcium phosphate and polyhydroxyalkanoates as biodegradable and bioactive bone substitutes with enhanced physicochemical properties", *Sustainable Materials and Technologies*, 38 (2023) e00722, DOI: 10.1016/j.susmat.2023.e00722
87. W. Snoch, E. Jarek, D. Milivojevic, J. Nikodinovic-Runic, M. Guzik "Physicochemical studies of novel sugar fatty acid esters based on (R)-3-hydroxylated acids derived from bacterial polyhydroxyalkanoates and their potential environmental impact", *Frontiers in Bioengineering and Biotechnology*, 11 (2023) 1112053, DOI: 10.3389/fbioe.2023.1112053
88. K. Sofińska, P. Batys, A. Cernescu, D. Ghosh, K. Skirlińska-Nosek, J. Barbasz, S. Seweryn, N. Wilkosz, R. Riek, M. Szymoński, E. Lipiec "Nanoscale insights into the local structural rearrangements of amyloid- β induced by bexarotene", *Nanoscale*, 15(35) (2023) 14606-14614, DOI: 10.1039/d3nr01608k
89. D. Solarz, T. Witko, R. Karcz, I. Malagurski, M. Ponjavic, S. Levic, A. Nestic, M. Guzik, S. Savic, J. Nikodinovic-Runic "Biological and physicochemical studies of electrospun polylactid/polyhydroxyoctanoate PLA/P(3HO) scaffolds for tissue engineering applications", *RSC Advances*, 13(34) (2023) 24112-24128, DOI: 10.1039/d3ra03021k
90. N. Stanisławska, G. Khachatryan, K. Khachatryan, M. Krystyan, M. Makarewicz, M. Krzan "Formation and Investigation of Physicochemical and Microbiological Properties of Biocomposite Films Containing Turmeric Extract Nano/Microcapsules", *Polymers* 15(4) (2023) 919, DOI: 10.3390/polym15040919
91. K. Stępnik, W. Kukula-Koch, W. Płaziński "Molecular and Pharmacokinetic Aspects of the Acetylcholinesterase-Inhibitory Potential of the Oleanane-Type Triterpenes and Their Glycosides", *Biomolecules*, 13(9) (2023) 1357, DOI: 10.3390/biom13091357

92. K. Stępnik, W. Kukula-Koch, W. Plazinski, K. Gawel, K. Gawel-Bęben, D. Khurelbat, A. Boguszewska-Czubara "Significance of Astragaloside IV from the Roots of *Astragalus mongholicus* as an Acetylcholinesterase Inhibitor—From the Computational and Biomimetic Analyses to the In Vitro and In Vivo Studies of Safety", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(11) (2023) 9152, DOI: 10.3390/ijms24119152
93. K. Stępnik, W. Kukula-Koch, W. Plazinski, M. Rybicka, K. Gawel "Neuroprotective Properties of Oleanolic Acid—Computational-Driven Molecular Research Combined with In Vitro and In Vivo Experiments", *Pharmaceutics*, 16(9) (2023) 1234, DOI: 10.3390/ph16091234
94. M. Strojceki "Modelling particle deposition onto surfaces in historic buildings", *Science of the Total Environment*, 896 (2023) 165205, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.165205
95. M. Synowiec, M. Radecka, A. Micek-Ilnicka "UV light enhanced catalytic performance of heteropolyacid-TiO₂ systems", *Journal of Catalysis*, 417 (2023) 481-496, DOI: 10.1016/j.jcat.2022.12.028
96. J. Szlachetko, J. Szade, E. Beyer, W. Błachucki, P. Ciochoń, P. Dumas, K. Freindl, G. Gazdowicz, S. Glatt, K. Guła, J. Hormes, P. Indyka, A. Klonecka, J. Kołodziej, T. Kołodziej, J. Korecki, P. Korecki, F. Kosiorowski, K. Kosowska, G. Kowalski, M. Kozak, P. Koziół, W. Kwiatek, D. Liberda, H. Lichtenberg, E. Madej, A. Mandziak, A. Marendziak, K. Matlak, A. Maximenko, P. Nita, N. Olszowska, R. Panaś, E. Partyka-Jankowska, M. Piszak, A. Prange, M. Rawski, M. Roman, M. Rosmus, M. Sikora, J. Sławek, T. Sobol, K. Sowa, N. Spiridis, J. Stępień, M. Szczepanik, T. Ślęzak, T. Tyliszczak, G. Ważny, J. Wiechecki, D. Wilgocka-Ślęzak, B. Wolanin, P. Wróbel, T. Wróbel, M. Zając, A. Wawrzyniak, M. Stankiewicz "SOLARIS national synchrotron radiation centre in Krakow, Poland", *European Physical Journal Plus*, 138(1) (2023) 10, DOI: 10.1140/epjp/s13360-022-03592-9
- 97.
98. M. Szota, B. Jachimska "Effect of Alkaline Conditions on Forming an Effective G4.0 PAMAM Complex with Doxorubicin", *Pharmaceutics*, 15(3) (2023) 875, DOI: 10.3390/pharmaceutics15030875
99. M. Szota, P. Wolski, C. Carucci, F.C. Marincola, J. Gurgul, T. Panczyk, A. Salis, B. Jachimska "Effect of Ionization Degree of Poly(amidoamine) Dendrimer and 5-Fluorouracil on the Efficiency of Complex Formation—A Theoretical and Experimental Approach", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(1) (2023) 819, DOI: 10.3390/ijms24010819
100. M. Szwed, S. Michlewska, K. Kania, M. Szczęch, A. Marczak, K. Szczepanowicz "New SDS-Based Polyelectrolyte Multicore Nanocarriers for Paclitaxel Delivery—Synthesis, Characterization, and Activity against Breast Cancer Cells", *Cells*, 12(16) (2023) 2052, DOI: 10.3390/cells12162052
101. M. Tataruch, V. Illeová, A. Miłaczewska, T. Borowski, M. Mihal', M. Polakovič "Inactivation and aggregation of R-specific 1-(4-hydroxyphenyl)-ethanol dehydrogenase from *Aromatoleum aromaticum*", *International Journal of Biological Macromolecules*, 234 (2023) 123772, DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2023.123772
102. V. Valovicova, E. Plevova, S. Vallova, L. Vaculikova, A. Smykalova, B.D. Napruszewska, E.M. Serwicka, S. Dolinska "Removal of amoxicillin and ampicillin using manganese dioxide/montmorillonite composite", *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 98(1) (2023) 197-203, DOI: 10.1002/jctb.7235

103. A. Walczyk, B.D. Napruszewska, J. Kryściak-Czerwenka, D. Duraczyńska, R. Karcz, E.M. Serwicka, P. Jeleń, M. Sitarz, Z. Olejniczak "Talc modified by milling and alkali activation: Physico-chemical characterization and application in base catalysis", *Applied Clay Science*, 232 (2023) 106768, DOI: 10.1016/j.clay.2022.106768
104. P. Warszyński, K. Szczepanowicz, G. Mordarski, M. Szczęch, P. Nowak, M. Lipka, D. Nowak, T. Sałek, R. Stańczyk "The influence of surface treatment with triethoxymethylsilane and triethoxyethylsilane sols on the permeability of powder coatings [Wpływ obróbki powierzchniowej zolami trietoksymetylosilanu i trietoksyetylosilanu na przepuszczalność pokryć farbami proszkowymi]", *Ochrona Przed Korozją*, 66(7) (2023) 192-196, DOI: 10.15199/40.2023.7.1
105. M. Wasilewska, M. Dąbkowska, A. Pomorska, P. Batys, B. Kowalski, A. Michna, Z. Adamczyk "Mechanisms of Fibroblast Growth Factor 21 Adsorption on Macroion Layers: Molecular Dynamics Modeling and Kinetic Measurements" *Biomolecules*, 13(12) (2023) 1709, DOI: 10.3390/biom13121709
106. M. Wasilewska, A. Michna, A. Pomorska, K. Wolski, S. Zapotoczny, E. Farkas, Z. Szittner, I. Szekacs, R. Horvath "Polysaccharide-based nano-engineered multilayers for controlled cellular adhesion in label-free biosensors", *International Journal of Biological Macromolecules*, 247 (2023) 125701, DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2023.125701
107. A. Winiarska, F. Ramirez-Amador, D. Hege, Y. Gemmecker, S. Prinz, G. Hochberg, J. Heider, M. Szaleniec, J.M. Schuller "A bacterial tungsten-containing aldehyde oxidoreductase forms an enzymatic decorated protein nanowire", *Science Advances*, 9 (22) (2023) eadg6689, DOI: 10.1126/sciadv.adg6689
108. K. Wolny-Koładka, R. Jarosz, L. Marcińska-Mazur, K. Gondek, A.H. Lahori, M. Szara-Bąk, T. Lošák, J. Szerement, J. Mokrzycki, R. Karcz, M. Mierzwa-Hersztek "The impact of mineral and organic supplements on the abundance of selected groups of culturable microorganisms in soil contaminated with heavy metals", *Journal of Elementology*, 28(3) (2023) 595-617, DOI: 10.5601/jelem.2023.28.2.2405
109. P. Wolski, T. Panczyk, A. Brzyska "Molecular Dynamics Simulations of Carbon Quantum Dots/Polyamidoamine Dendrimer Nanocomposites", *The Journal of Chemical Chemistry C*, 127 (2023) 16740-16750, DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c04661
110. P. Wójcik, M. Głanowski, B. Mrugała, M. Prochner, O. Zastawny, M. Flejszar, K. Kurpiewska, E. Niedziałkowska, W. Minor, M. Oszejca, A.J. Bojarski, A.M. Wojtkiewicz, M. Szaleniec "Structure, Mutagenesis, and QM:MM Modeling of 3-Ketosteroid Δ^1 -Dehydrogenase from *Sterolibacterium denitrificans*—The Role of a New Putative Membrane-Associated Domain and Proton-Relay System in Catalysis", *Biochemistry*, 62(3) (2023) 808-823, DOI: 10.1021/acs.biochem.2c00576
111. Y. Wu, W. Zhao, S. Hyun Ahn, Y. Wang, E.D. Walter, Y. Chen, M.A. Derewiński, N.M. Washton, K.G. Rappé, Y. Wang, D. Mei, S. Bong Hong, F. Gao "Interplay between copper redox and transfer and support acidity and topology in low temperature NH_3 -SCR", *Nature Communications*, 14(1) (2023) 2633, DOI: 10.1038/s41467-023-38309-8
112. M. Wytrwał, M. Sekuła-Stryjewska, A. Pomorska, E. Oclon, E. Zuba-Surma, S. Zapotoczny, K. Szczubiałka "Cellular Response to Bone Morphogenetic Proteins-2 and -7 Covalently Bound to Photocrosslinked Heparin—Diazoresin Multilayer", *Biomolecules*, 13(5) (2023) 842, DOI: 10.3390/biom13050842

113. J. Zawała, J. Miguet, P. Rastogi, O. Atasi, M. Borkowski, B. Scheid, G.G. Fuller "Coalescence of surface bubbles: The crucial role of motion-induced dynamic adsorption layer", *Advances in Colloid and Interface Science*, 317 (2023) 102916, DOI: 10.1016/j.cis.2023.102916
114. A. Zięba, K. Stan-Głowińska, Ł. Rogal, P. Czaja, J. Przewoźnik, R. Chulist, D. Duraczyńska, L. Lityńska-Dobrzyńska "Microstructural characterization of rapidly solidified Al-13.5 at.% Cr and Al-13.5 at.% V alloys for catalytic applications", *Journal of Materials Science*, 58 (2023) 13422–13436, DOI: 10.1007/s10853-023-08842-4
115. M. Zimowska, M. Śliwa, H. Pálková, J. Gurgul, R.P. Socha "Microwave treatment effect on the enhanced basicity of porous clay heterostructured composites derived from Laponite", *Applied Surface Science*, 619 (2023) 156768, DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.156768
116. P. Żeliszewska, J. Szych, M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Kinetics of Immunolates Deposition at Abiotic Surfaces under Flow Conditions: Towards Quantitative Agglutination Assays", *International Journal of Molecular Sciences*, 24(1) (2023) 692, DOI: 10.3390/ijms24010692
117. P. Żeliszewska, M. Wasilewska, J. Szych, Z. Adamczyk "Mechanism of Anti-Salmonella Rabbit Immunoglobulin Adsorption on Polymer Particles", *Biomolecules*, 13(9) (2023) 1390, DOI: 10.3390/biom13091390

PUBLIKACJE W CZASOPISMACH SPOZA LISTY MEiN

1. M. Witko, L. Mankiewicz, M. Sokołowski, Ewaluacja "Razem, nie osobno", *Forum Akademickie*, e-wydanie 01.02.2023
2. M. Witko, L. Mankiewicz, M. Sokołowski, Reforma PAN "Samorządność, nie centralizacja", *Forum Akademickie*, e-wydanie 17.03.2023
3. M. Witko, L. Mankiewicz, M. Sokołowski, Reforma PAN "Samorządność, nie centralizacja" *Forum Akademickie*, print FA 2/2023
4. M. Witko, "Instytuty zapracowały na markę PAN", *Forum Akademickie*, e-wydanie 23.05.2023

PUBLIKACJE NAUKOWE Z ROKIEM WYDANIA 2024

1. O. Adamczyk, M. Szota, K. Rakowski, M. Prochownik, D. Doveiko, Y. Chen, B. Jachimska "Bovine Serum Albumin as a Platform for Designing Biologically Active Nanocarriers—Experimental and Computational Studies", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(1) (2024) 37, DOI: 10.3390/ijms25010037
2. Z.U.D. Babar, M.B. Hanif, X.L. Lin, J. Gao, M. Mosiątek, C.-X. Li "Design of a highly stable and conductive electrolyte by suppressing barium copper oxide formation at the grain interfaces in Cu_x -doped $BaCe_{0.7}Zr_{0.1}Dy_{0.2-x}O_{3-\delta}$ sintered at a low temperature (1200 °C) for SOFCs", *Journal of Colloid and Interface Science*, 654 (2024) 1124-1135, DOI: 10.1016/j.jcis.2023.10.094
3. W. Grzebieniarsz, J. Tkaczewska, L. Juszcak, N. Nowak, P. Krzyściak, P. Guzik, M. Kasprzak, M. Zimowska, E. Jamróz "Design of active double-layer gel coatings based on furcellaran-gelatin and aqueous butterfly pea (*Clitoria ternatea*) flower extract for prolonging the shelf-life of salmon (*Salmo salar*)", *Progress in Organic Coatings*, 186 (2024) 107945, DOI: 10.1016/j.porgcoat.2023.107945

4. M.B. Hanif, S. Rauf, A. Sultan, Z. Tayyab, K. Zheng, H. Makarov, D. Madej, W. Łasocha T. Roch, M. Mosiałek, R.T. Baker, C.-X. Li, M. Motola "Boosting the electrochemical performance of oxygen electrodes via the formation of LSCF-BaCe_{0.9-x}Mo_xY_{0.1}O_{3-δ} triple conducting composite for solid oxide fuel cells: Part II", *Energy*, 289 (2024) 129985, DOI: 10.1016/j.energy.2023.129985
5. C. Jonkergouw, P. Savola, E. Osmekhina, J. van Strien, P. Batys, M.B. Linder "Exploration of Chemical Diversity in Intercellular Quorum Sensing Signalling Systems in Prokaryotes", *Angewandte Chemie - International Edition*, 63 (2024) e202314469, DOI: 10.1002/anie.202314469
6. A. Kežionis, T. Šalkus, M. Dudek, D. Madej, M. Mosiałek, B.D. Napruszewska, W. Łasocha, M.B. Hanif, M. Motola "Investigation of alumina- and scandia-doped zirconia electrolyte for solid oxide fuel cell applications: Insights from broadband impedance spectroscopy and distribution of relaxation times analysis", *Journal of Power Sources*, 591 (2024) 233846, DOI: 10.1016/j.jpowsour.2023.233846
7. A. Michna, A. Pomorska, W. Płaziński, D. Lupa, V. Lutsyk, J. Odrobińska-Baliś, S. Zapotoczny, Z. Adamczyk "Formation of modified chitosan/carrageenan multilayers at silica: Molecular dynamics modeling and experiments", *Food Hydrocolloids*, 146 (2024) 109222, DOI: 10.1016/j.foodhyd.2023.109222
8. A. Panek, P. Wójcik, A. Świzdor, M. Szaleniec, T. Janeczko "Biotransformation of Δ1-Progesterone Using Selected Entomopathogenic Filamentous Fungi and Prediction of Its Products' Bioactivity", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(1) (2024) 508, DOI: 10.3390/ijms25010508
9. P. Tworek, K. Rakowski, M. Szota, M. Lekka, B. Jachimska, "Changes in Secondary Structure and Properties of Bovine Serum Albumin as a Result of Interactions with Gold Surface", *ChemPhysChem*, 25(2) (2024) e202300505, DOI: 10.1002/cphc.202300505
10. D. Żmudziński, U. Goik, P. Ptaszek, A. Ptaszek, J. Barbasz, J. Banaś, D. Lupa "The influence of thermodynamic qualities of a solvent on the physicochemical properties of lentil protein concentrate—Second virial coefficient study", *Food Chemistry* 434 (2024) 137329 DOI: 10.1016/j.foodchem.2023.137329

PRACE NAUKOWE W DRUKU

PUBLIKACJE NAUKOWE W DRUKU

1. M. Nattich-Rak, D. Kosior, M. Morga, Z. Adamczyk, „ Kinetics of Human Serum Albumin Adsorption on Macroion Functionalized Silica”, *ChemPhysChem*, in press
2. A. Pacuła, J. Gurgul, A. Micek-Ilnicka, P. Pietrzyk, M. Ruggiero-Mikołajczyk, B.D Napruszewska, D. Duraczyńska, G. Cempura "Capacitors and catalyst supports based on pyrolytic carbon deposited on metals/metal oxides derived from hydrotalcite-like materials", *Journal of Materials Science*, in press
3. M. Sadowska, M. Nattich-Rak, M. Morga, Z. Adamczyk, T. Basinska, D. Mickiewicz, M. Gadzinowski „Anisotropic Particle Deposition Kinetics from QCM: Beyond the Sphere Paradigm”, *Langmuir*, in press

STRESZCZENIA W MATERIAŁACH POKONFERENCYJNYCH

1. I. Aleksic, G. Oleksy, K. Krämer, D. Hege, Y. Gemmecker, J. Heider, M. Szaleniec "Standardizing the methodology for transformation of anaerobic bacteria as hosts for recombinant enzyme production and development of fast activity screening for tungsten-dependent aldehyde oxidoreductases", 16th International Symposium on Biocatalysis & Biotransformations Biotrans 2023, La Rochelle 25-29.06.2023, N°1399
2. I. Aleksic, M. Tataruch, M. Polakovic, V. Illeova, A. Miłaczewska, P. Cabadaj, A. Kluza, M. Szaleniec, T. Borowski "1-(4-hydroxyphenyl)-ethanol dehydrogenases from *A. aromaticum* - mechanism of inactivation" Book of abstracts Posters. BIOTRANS - International Symposium on Biocatalysis & Biotransformations, La Rochelle 25-29.06.2023, str. 980
3. G. Antczak, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, B. Gołyszny, N. Spiridis "Bi-molecular layers of CoPc and F₁₆CuPc on Ag(100): how the structure factor can be used to identify chiral domains", Book of Abstracts, XII Workshop on Applications of Scanning Probe Microscopy – STM/AFM 2023, Faculty of Physics, Astronomy and Applied Computer Science Jagiellonian, Zakopane, Poland, 29.11-03.12.2023, str.40
4. S. Antropov, L. Bratasz, K. Poznańska, M. Bury, "3D model of a panel painting with a developed craquelure pattern", Book of Abstracts. Wood Science and Technology III, Maastricht, Holandia, 19.10.2023
5. S. Antropov, M. Bury, K. Poznańska, Ł. Bratasz. "Trójwymiarowy model obrazu na desce z rozwinięta siatka spękań", Book of Abstracts. Future of the Past - Innovative Research and Preservation of Cultural Heritage, Toruń, 14.06.2023
6. P. Batys, M. Morga, P. Bonarek, T. Kastinen, D. Lupa, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, "Understanding the pH dependence of poly l-lysine and poly lglutamic acid complex formation", Book of Abstracts. 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023), 3-8.09. 2023, Naples, Italy, str.426
7. S. Baumgart, D. Kupczyk, A. Archęła, O. Koszła, P. Sołek, W. Płaziński, A. Płazińska, T. Kosmowski, R. Studzińska "Novel N-cyclopentyl derivatives of pseudothiohydantoin with potential anticancer and 11β-HSD inhibitory activities.", Book of Abstracts, XXIV International Symposium "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds". Łódź, November 24, 2023. (T. Cierpiął, J. Drabowicz Eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Humanistyczno-Przyrodniczego im. Jana Długosza w Częstochowie, P-008 [ISBN 978-83-66536-91-3]
8. A. Biessikirski, M. Dworzak, S. Gotovac-Atlagić, S. Sukur, M. Pytlik, Ł. Kuterasiński „Potencjalne zastosowanie mikroporowatych dodatków węgla drzewnego w produkcji nieidealnych materiałów wybuchowych” XIII konferencja naukowo-techniczna: 4-6.10.2023, Ustroń. str. 27
9. B. Blyzniuk, A. Dziwoki, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, E. Madej, E. Młyńczak, M. Szpytma, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, and N. Spiridis, "Magnetization reversal in Fe(001) films grown on MgO(001) by magnetic field assisted molecular beam epitaxy", Abstract book, 36th European Conference Physics of Magnetism 2023 (PM'23), Poznań 2023, str. 107
10. M. Borkowski, D. Lupa, B. Braunschweig, G. Gochev, J. Zawała, "Synergistic foaming systems based on surface-modified magnetic nanoparticles and amino acid surfactants in destabilization of real foams in a magnetic field", 9th Bubble and Drop Conference, June 11-16, 2023, Lublin, Poland, str. 20

11. S. Bujok, A. Bridarolli, M. Łukomski, Ł. Bratasz "Wpływ szybkich i wolnych zmian wilgotności względnej na obiekty wrażliwe", Book of Abstracts. XXIII Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków 2023, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych UW, Warszawa 2023, str. 26
12. S. Bujok, K. Kruczała, Ł. Bratasz "Warunki pęknięcia obiektów w poli(chloroku winylu)", Book of Abstracts. Future of the Past 2023, 14-15.06.2023, Centrum Badań i Konserwacji Dziedzictwa Kulturowego UMK, Toruń 2023, str. 77
13. M. Bury, S. Antropov, Ł. Bratasz, "Komputerowy model obrazów na płótnie", Future of the Past - Conference on Innovative Research and Preservation of Cultural Heritage, Toruń, 14-15.06.2023, Centrum Badań i Konserwacji Dziedzictwa Kulturowego UMK, Toruń 2023, str.30
14. A. Drzewiecka-Matuszek, J. Dedecek, D. Rutkowska-Zbik "DFT studies of O₂ activation by iron and nickel bi-metallic sites", The 6th Quantum Bio-Inorganic Chemistry Conference, 29.08-1.09.2023, Warszawa, Polska, str. 41
15. A. Drzewiecka-Matuszek, J. Dedecek, D. Rutkowska-Zbik, "Dioxygen Activation over Binuclear Transition Metal Centres", Modeling Interactions in Biomolecules 2023, 10-14.09.2023, Pruhonice, Rep. Czeska, str.50
16. A. Drzewiecka-Matuszek, A. Kornas, E. Tabor, D. K. Wierzbicki, J. E. Olszowka, R. Pilar, J. Dedecek, M. Sliwa, H. Jirglova, S. Sklenak, D. Rutkowska-Zbik, K. Mlekodaj "Activation of molecular oxygen over binuclear iron centers: in-sights from spectroscopy and DFT modeling", Molecules and Light 2023, 24-27.09.2023, Kraków, Polska Book of Abstracts, V Autumn Meeting of the Polish Photochemistry Group, Krakow, 2023, str.138
17. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Zbik „Aktywacja tlenu cząsteczkowego na centrach bimetalicznych: badania DFT” Book of abstract 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, 18-22.09.2023, Toruń, str. 649 [ISBN 978-60988-39-8]
18. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Zbik, „O₂ binding by (M-porphine)₂ dimers (M = Fe, Ni, Mn, Co): DFT Studies”,55. Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 22-24.03.2023, Kraków, Polska str. 48 [ISBN 978-83-60514-36-8]
19. M. Dudek, M. Mosiałek, A. Sultan, M.B. Hanif "Sr-doped BCY–LSCF composite cathodes: preparation, properties and electrochemical tests in ceramic proton-conducting fuel cells", Book of abstracts, 7th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC7) 28-31.08.2023, Brno, Czech Republic (J. Kučerík, P. Šiler, A. Rotaru eds.) str. 226 [ISBN 978-606-11-8461-3]
20. D. Duraczyńska, A. Michalik, B.D. Napruszewska, A. Walczyk, E.M. Serwicka "Deposition of TiO₂ nanoparticles prepared by inverse microemulsion in exfoliated montmorillonite: SEM/TEM/EDX study", LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 22-24.03.2023 Kraków, Polska, str. 49 [ISBN 978-83-60514-36-8]
21. A. Dziwoki, B. Blyzniuk, K. Freindl, N. Kwiatek, E. Madej, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki, N. Spiridis, "Sample holders and adapters for Magnetic Field Assisted Epitaxial Growth of Magnetite Films" Abstract book, 36th European Conference on Surface Science 28.08-01.09.2023, Faculty of Physics and Applied Informatics of University of Lodz, Lodz 2023, str. 447

22. K. Freindl, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, N. Spiridis, "Oxidation Resistance of Fe on Ru(0001) – the Role of the Substrate and Preparation Conditions", Abstract book, 36th European Conference on Surface Science 28.08-01.09.2023, Faculty of Physics and Applied Informatics of University of Lodz, Lodz 2023, str. 456
23. M. Gackowski, A. Selent, I. Ainasoja, M. Mazur, M. Hunger, J. Datka, V.-V. Telkki "Mechanism of the cleansing effect during the TBAOH-treatment of ultra-stable zeolite Y" LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2023, str. 52 [ISBN 978-83-60514-36-8]
24. D. Gawel, G. Gochev, G.G. Fuller, J. Zawała, "Differences in coalescence of surface bubbles in solutions of simple surfactant and protein", Book of Abstracts, 9th Bubble and Drop Conference, June 11-16, 2023, Lublin, Poland, str. 17
25. P. Gnacek, A. Barbasz, D. Ungor, A. Czyzowska, E. Csapó, J. Maciejewska-Prończuk, P. Żeliszewska, M. Oćwieja "Comparative Studies on Cytotoxicity of Gold Nanoparticles and Protein-Stabilized Fluorescence Gold Nanoclusters" Book of Abstracts. 8th World Congress on Recent Trends in Nanotechnology, Lizbona, Portugalia, 2023, str. NDDTE111-1 [ISBN: 978-1-990800-16-0] DOI: 10.11159/nddte23.111
26. P. Gnacek, O. Kowalska, N. Piergies, P. Niemiec, D. Duraczyńska, M. Oćwieja "Charakterystyka spektroskopowa nowych koniugatów chloropromazyny z nanocząstkami złota" Książka Abstraktów X Łódzkiego Sympozium Doktorantów, Łódź 2023, str. P-68
27. P. Gnacek, N. Piergies, O. Kowalska, M. Oćwieja, P. Niemiec "Spectroscopic studies on the adsorption of neuroleptics belonging to phenothiazine derivatives on gold nanoparticle surfaces" Book of Abstracts. 12th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, Kraków, 2023, str. 259
28. G. Gochev, D. Exerowa, B. Braunschweig, E. Schneck, R. Miller "Predicting the Stability of Protein Foams: a Case Study on β -Lactoglobulin", Book of Abstracts. 9th Bubble and Drop Conference, June 11-16, 2023, Lublin, Poland, Book of Abstracts, str. 5
29. G. Gochev, D. Gawel, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, E. V. Aksenenko, V. I. Kovalchuk, E. Schneck, R. Miller, J. Zawała "Current View on Adsorption Dynamics and Dilational Rheology of Bovine Serum Albumin at Water/Air Interface", Book of Abstracts. 9th Bubble and Drop Conference, June 11-16, 2023, Lublin, Poland, Book of Abstracts, str. 81
30. B. Gołyszny, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, G. Antczak, "Physical vapor deposition of ultrathin F16CuPc films on Ag(100) surfaces", Abstract book, 36th European Conference on Surface Science, Faculty of Physics and Applied Informatics of University of Lodz, Lodz 2023, str. 484
31. B. Gołyszny, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, G. Antczak, "Structural and electronic properties of F16CuPc thin films on Ag (100) surfaces", Book of Abstracts. XII Workshop on Applications of Scanning Probe Microscopy – STM/AFM 2023, 29.11-03.12.2023, Faculty of Physics, Astronomy and Applied Computer Science Jagiellonian University, Zakopane 2023, str. 131
32. A. Gorczyca, S. W. Przemieniecki, M. Niemiec, S. Bednarz, M. Guzik. "Utilization of PHA production waste streams to plants fertilization and stimulation." Modern polymeric materials for environmental applications : 8th international seminar including special session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications' Vol. 8, iss. 2 / ed. by Krzysztof Pielichowski ; Cracow University of Technology. — Kraków : Department of Chemistry and Technology Polymers. Cracow University of Technology, 2023. — str. 121, [ISBN 978-83-966714-0-0]

33. M. Guzik, "Polyhydroxyalkanoate – polymers from bacteria – synthesis and applications" Modern polymeric materials for environmental applications : 8th international seminar including special session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications' Vol. 8, iss. 2 / ed. by Krzysztof Pielichowski ; Cracow University of Technology. — Kraków : Department of Chemistry and Technology Polymers. Cracow University of Technology, 2023. — str. 127, [ISBN 978-83-966714-0-0]
34. M. Guzik, K. Harażna, K. Kasarełło, D. Solarz-Keller, A. Cudnoch-Jędrzejewska, T. Witko, Z. Rajfur, M. Seta "A novel poly(3-hydroxyoctanoate) diclofenac decorated dressings for wound healing", Book of Abstracts, Polymers/Composites/3Bs Materials 2023 Joint Intl. Conference, Bangkok, Tajlandia, 13-28.02.2023, p. 55
35. M. Guzik, J. Prajsnar, E. Cichoń, R. Karcz, J. Kryściak-Czerwenka, „Advancing Sustainable Bioplastics through Microbial Upcycling for Novel Biopolymer Production”, 10th Conference of Mikrobiokosmos, Larisa, Grecja, 17-19.9.2023, PP113a
36. K. Harażna, A. T. Fricker, C. S. Taylor, R. Konefał, A. Medaj, S. Bujok, M. Zimowska, B. Leszczyński, A. Wróbel, A. J. Bojarski, I. Roy, M. Guzik, "Bacterial polyester – poly(3-hydroxyoctanoate) (P(3HO)) as a versatile material for medical applications", Book of Abstracts. Tissue Engineering and Regenerative Medicine International Society – Asia Pacific (TERMIS-AP), 16-19.10.2023, Hong Kong Science Park, The Chinese University of Hongkong, Hongkong 2023, str. 105
37. B. Jachimska, “Structure and function of protein corona at the nanoparticles interface” Konferencję „Copernicus Dialogues”, series titled -The Focus of Polish-Italian cooperation in the area of biomedicine, 27.10.2023, Rome, Italy, str. 21
38. B. Jachimska, M. Szota, O. Michel, J. Kulbacka „ Physicochemical properties and biological activity of dendrimer complex with fluorouracil” Book of abstract, Advances in Clinical and Experimental Medicine, 5th International Wroclaw Scientific Meeting, Wrocław, Poland, 2023, str. 67 [ISSN 2451-2680]
39. B. Jachimska, M. Szota, U. Szwedowicz, N. Rembiałkowska, A. Janicka-Kłós, J. Kulbacka „Theranostic nanocarriers of doxorubicin based on dendrimer” Book of abstract, Advances in Clinical and Experimental Medicine, 5th International Wroclaw Scientific Meeting, Wrocław, Poland, 2023, str. 68 [ISSN 2451-2680]
40. D. Jantas, A. Roman, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, W. Lasoń "Biosafety and neuroprotective potency of polymer-based theranostic nanoparticles containing carnosic acid", Book of abstract, 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, May 29 - June 1, 2023, Kraków, Poland, str. 20
41. J. Kaim, M. Śliwa, K. Samson, M. Zimowska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Podobiński, M. Witko, D. Rutkowska-Żbik „The supported Cu-Ni bimetallic catalysts for vapor phase conversion of furfuryl aldehyde”; Book of abstracts. 15th European Congress on Catalysis EuropaCat2023, 27.08 – 1.09.2023, Praga, Rep. Czeska, BIO-SOL-13, str. 92
42. V. Kaipanchery, A. Drzewiecka-Matuszek, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, D. Rutkowska-Zbik „Badania aktywacji wiązań C-H w alkanach metodą DFT” 65. Zjazd PTChem, 18-21.09.2023, Toruń, Polska, str. 507 [ISBN 978-60988-39-8]
43. V. Kaipanchery, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Zbik, “Density Functional Studies on Photocatalytic Methane Coupling over Au/TiO₂”, 3rd Momentum International Congress “Energy at the Crossroads: Accelerating innovation in the age of disruption”, Gif-sur-Yvette, Francja, 8-10.03.2023, Book of Abstracts, str. 56

44. V. Kaipanchery, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Zbik, "Methane Oxidative Coupling on Au-TiO₂ Catalyst: DFT Studies", EuropaCat2023, 15th European Congress on Catalysis, 27.08-1.09.2023, Prague, Czech Republic
45. K. Kamińska, M. Procter, M. Regulska, M. Leśkiewicz, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, W. Lasoń, A. Basta-Kaim "Polymeric -based nanocarriers for delivery of neuroprotective drugs through blood-brain barrier", 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, May 29 - June 1, 2023, Kraków, Poland, Book of abstracts str. 74
46. A. Kamińska, J. Szechyńska, P. Komorek, B. Jachimska "The analysis of the influence of selected factors on changes in α -synuclein structure", Book of Abstracts. 5th International Wrocław Scientific Meeting, Wrocław, 19-21 Październik 2023, str. 26 [ISSN 2451-2680]
47. P. Kasza, A. Zięba, M. Ciężkowska, K. Kałahurska, D. Wojcieszczak, W. Andrysiewicz, R. Twaróg, W. Binias, M. Rogowski, R. Socha „Opracowanie zespołu czujników do badania jakości prochu poliamidowego wykorzystanego w procesie wytwarzania przyrostowego techniką SLS i algorytmu kompensującego pracę drukarki 3D SLS”, 65. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 18-22.09.2023, Toruń, Książka abstraktów, str. 416. [ISBN 978-83-60988-39-8]
48. D. S. Kharytonau, M. A. Osipenko, K. Skowron, G. Mordarski, E. Jarek, M. Zimowska, J. Ryl, P. Warszyński "Chitosan-based Coatings for Corrosion Protection of Biodegradable Mg Alloys", Book of Abstracts. 35th Conference on Surface Modification Technologies, 18-22.09.2023, Helmut-Schmidt Universität/Universität der Bundeswehr, Hamburg 2023, str. 43
49. K. Kieca, M. Oszajca, D. Rutkowska-Zbik, G. Stochel, "Badania S-nitrozacji z udziałem rozpuszczalnej w wodzie porfiryryny żelazowej”, 65. Zjazd PTChem, 18-21.09.2023, Toruń, Polska, Książka abstraktów 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem, 18-22.09.2023, Toruń, str. 322, [ISBN 978-83-60988-39-8]
50. D. Kiphart, F. Stobiecki, M. Matczak, A. Mandziak, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Kuświk "Magnetic domains without domain walls in Tb/Co layered films after patterning by Ga⁺ focused ion beam", Book of Abstracts, Magnetism, Interactions and Complexity: innovative ideas on spin wave dynamics and transport properties in low-dimensional materials - satellite workshop to The European Conference Physics of Magnetism 2023, 24-28.07.2023, Będlewo 2023, str. 34
51. R. Knura, K. Skibińska, S. Sahayaraj, J. Gwizdak, M. Wojnicki, G. Putynkowski, R.P. Socha "The influence of annealing on electronic properties of ALD grown Ge:ZnO thin films”, 36th European Conference on Surface Science, 28.08-01.09.2023, Łódź, ECOSS Abstract Book, str. 475
52. R. Knura, K. Skibińska, S. Sahayaraj, G. Putynkowski, R.P. Socha "Wpływ warunków depozycji metodą ALD na jednorodność warstw tlenków metali”, 65. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 18-22.09.2023, Toruń, Książka abstraktów, str. 692 [ISBN 978-83-60988-39-8]
53. R. Knura, K. Skibińska, S. Sahayaraj, Z. Starowicz, G. Putynkowski, R.P. Socha "Właściwości półprzewodnikowe i optyczne cienkich warstw ZnO domieszkowanych Ge nanoszonych metodą ALD”, 65. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 18-22.09.2023, Toruń, Książka abstraktów, str. 663 [ISBN 978-83-60988-39-8]
54. D. Kosior, G. Gochev, P. Batys, J. Zawąła "Effect of n-hexane vapors on the behavior of air bubbles in solutions of non-ionic and ionic surfactants", Book of Abstracts. 9th Bubble and Drop Conference, 11-16.06.2023, Lublin, Poland, str. 80

55. R. Kosydar, D. Duraczyńska, M. Sadowska, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Oćwieja "Platinum nanoparticles with various surface charge deposited on silica for hydrogenation of acetophenone", Book of Abstracts LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 22-24.03.2023 Kraków, Polska, str. 36 [ISBN 978-83-60514-36-8]
56. R. Kosydar, E. Lalik, K. Samson, D. Duraczyńska, J. Gurgul, T. Szumełda, A. Drelinkiewicz "Composition-dependent activity of bimetallic PdIr_x/carbon catalysts in furfural conversion via competitive hydrogenation and acetalization", 15th European Congress on Catalysis EuropaCat, 27.08-01.09.2023, Prague, Czechia, Book of Abstracts poster BIO-P-066, str. 146
57. O. Kowalska, A. Barbasz, P. Gnacek, M. Oćwieja "Biological effects induced by conjugates of neuroleptics with gold nanoparticles" Books of Abstracts 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Kraków, 26-29.09.2023, str. 42 [ISBN: 978-83-968701-3-1]
58. O. Kowalska, M. Kula-Maximenko, A. Gorczyca, E. Pocięcha, A. Lada, J. Maciejewska-Prończuk, M. Oćwieja "Wpływ zaprojektowanych nanocząstek złota na mikroalgi *Chlorella vulgaris*" Książka Abstraktów X Łódzkiego Sympozium Doktorantów, Łódź 2023, str. P-62
59. K. Kozak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Optimization of the fabrication process of conductive coatings based on nickel-silver core-shell nanoparticles at low sintering temperature" 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Kraków, Polska, 26-29.09.2023, Book of Abstracts, str. 68
60. K. Kozak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Optymalizacja procesu wytwarzania przewodzących powłok na bazie nanocząstek o strukturze „core-shell” nikiel-srebro w niskich temperaturach spiekania" XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju” Lublin, 23-26 marca 2023 r, Abstrakty str.147-148
61. K. Kozak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Udoskonalenie przewodnictwa powłok poprzez optymalizację procesu syntezy nanocząstek nikiel-srebro o strukturze „core-shell” III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Bliżej Chemii” Kraków, 07-08.01.2023, książka abstraktów, str. 74
62. K. Kruczała, M. Bucki, M. Saad, S. Bujok, Ł. Bratasz, K. Górecki, D. Pawcenis, T. Rijavec, I. Kralj Cigic, M. Strlič "Determining the correlation between chemical changes and mechanical properties of artificially aged poly(vinyl chloride)", Book of Abstracts. LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IkiFP PAN, Kraków 2023, str. 10 [ISBN 978-83-60514-36-8]
63. T. Kruk, M. Szczęch, W. Tomal, M. Rak, K. Łęgowski, M. Bzowska, A. Hinz, S. Łukasiewicz, M. Szuwarzyński, K. Szczepanowicz, "Control of specific/non-specific protein adsorption – functionalization of polyelectrolyte coatings for biomedical application", Book of abstracts, 37th European Colloid and Interface Society Conference, 03-08.09.2023, Naples, Italy, str. 595.
64. T. Kruk, M. Szczęch, W. Tomal, M. Rak, K. Łęgowski, M. Bzowska, A. Hinz, S. Łukasiewicz, M. Szuwarzyński, K. Szczepanowicz "Characterization and functionalization of polyelectrolyte coatings as a new platform for biomedical application – control of specific/nonspecific protein adsorption", Book of abstracts 13th International Symposium on Polyelectrolytes, 28 August – 1 September 2023, Prague, Czechia, str. 143.
65. K. Krużel, J. Odrobińska-Baliś, K. Szczepanowicz "Kapsuły o ciekłych olejowych rdzeniach jako potencjalne nośniki substancji aktywnych w leczeniu chorób eurodegeneracyjnych", Book of abstracts, XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju” Lublin, 23-26.03.2023 r, str. 39-40

66. L. Krzemiń, J. Barbasz, "The role of tissue in micro indentation tests of a plant cell", Book of abstracts, 36th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, 24-28.09.2023, Jagiellonian University, Kraków, Poland, str. 73
67. Ł. Kuterasiński, M. Sadowska, P. Żeliszewska, B. D. Napruszewska, M. Pytlik, A. Biessikirski „Experimental studies and thermodynamic calculations on the potential application of faujasite as an ingredient of ANFO-based explosives” 55 Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 22-24.03.2023, Kraków, str. 30. [ISBN 978-83-60514-36-8].
68. Ł. Kuterasiński, M. Sadowska, P. Żeliszewska, B. D. Napruszewska, M. Pytlik, A. Biessikirski „Copper-containing faujasite as a modifier of ANFO-type explosives” Book of Abstracts. 9th Conference of the Federation of the European Zeolite Associations (FEZA2023), 2-6.07.2023, Portorož-Portorose, Słowenia, str. 112
69. K. J. Legawiec, M. Kruszelnicki, P. Basařová, J. Zawała, M. Zawadzka, I. Polowczyk, „Dynamika adhezji pęcherzyka gazu na powierzchniach o różnej hydrofobowości estryfikowanych n-alkoholami w obecności biosurfaktantu glikolipidowego”, Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, 16-20.04.2023, Lublin, Polska, str. 37
70. V. Lutsyk, W. Płaziński “Zastosowanie hybrydowego podejścia MD/QM do badania konformacji pierścieni piranozowych kwasów L-iduronowego i L-guluronowego oraz ich pochodnych”, X Konferencja Naukowa "Innowacje w Praktyce" Arena Lublin, 15-16.06.2023, Centrum Innowacji Naukowo-Edukacyjnych, Lublin 2023, str. 96 [ISBN 978-83-943796-9-8]
71. K. Łęgowski, T. Kruk, K. Szczepanowicz, „Właściwości antyadhezyjne powłok szczepionych glikolami polietylenowymi", Book of abstracts, XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, 23-26 marca 2023, Lublin, Polska, str. 153 [ISBN 978-83-67670-09-8]
72. K. Łęgowski, M. Rak, T. Kruk, K. Szczepanowicz, „Antyadhezyjne właściwości filmów polielektrolitowych", Book of abstracts, III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Blżej Chemii”, 07-08.01.2023, Kraków, Polska, str. 22
73. K. Łęgowski M. Rak, T. Kruk, K. Szczepanowicz „Antyadhezyjne właściwości filmów polielektrolitowych", Book of abstracts, III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Blżej Chemii”, 07-08.01.2023, Kraków, Polska, str. 86
74. J. Maciejewska-Prończuk, P. Żeliszewska, K. Matras-Postołek, M. Wasilewska, M. Gajewska, P. Gnacek, D. Ungor, E. Csapó, M. Oćwieja "Kinetics of fluorescent gold nanocluster deposition at solid/liquid interfaces" Book of Abstracts. 24th Polish Concerence of Chemical and Process Engineering, Szczecin, 2023, str. 239, [ISBN 978-83-7663-359-6]
75. J. Maciejewska-Prończuk, P. Żeliszewska, M. Oćwieja "Fluorescencyjne materiały warstwowe na bazie nanoklastrów złota" Książka Abstraktów XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, Lublin, 2023, str. 141, [ISBN 978-83-67670-09-8]
76. T. M. Majka, K. Pielichowski, K. N. Raftopoulos, M. Guzik, A. Szeligowski, T. Witko, O. Zastawny, A. Kaczmarek, A. Ślósarczyk, A. Zima, E. Cichoń, S. Skibiński, J. Czechowska "Selected properties of UV-aged polyhydroxybutyrate/ β -tricalcium phosphate [P (3HB)]/ β -TCP composites" Modern polymeric materials for environmental applications : 8th international seminar including special session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications' Vol. 8, iss. 2 / ed. by Krzysztof Pielichowski ; Cracow University of Technology. — Kraków : Department of Chemistry and Technology Polymers. Cracow University of Technology, 2023. — str. 301–308, [ISBN 978-83-966714-0-0]

77. E. Masoumifeshani, D. Rutkowska-Zbik, T. Korona "How to analyse excited state densities? Dependence of molecular descriptors on the choice of theoretical method and basis set", *Molecules and Light 2023*, 24-27.09.2023, Kraków, Polska, Book of Abstracts, V Autumn Meeting of the Polish Photochemistry Group, Krakow, 2023, str. 139
78. M. Matczak, B. Anastaziak, M. Urbaniak, D. Kiphart, F. Stobiecki, A. Mandziak, E. Madej, D. Wilgocka-Słęczak, P. Kuświk "Spin chirality in Co/Ni layered system before and after plasma oxidation" *Magnetism, Interactions and Complexity: innovative ideas on spin wave dynamics and transport properties in low-dimensional materials - satellite workshop to The European Conference Physics of Magnetism 2023*, 24 - 28 July 2023 Będlewo 2023, str. 67
79. D. Matyszewska, P. Fontaine, P. Batys, M. Zaborowska, "Physicochemical description of the interactions of drugs used in the treatment of chronic obstructive pulmonary disease (COPD) with model lung surfactants", *Book of Abstracts, 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023)*, 3-8.09. 2023, Naples , Italy, str. 214
80. O. Mazuryk, E. Janczy-Cempa, I. Gurgul, J. Łagosz, D. Rutkowska-Zbik, G. Stochel, M. Brindell „Polipirydylowe kompleksy rutenu zawierające 4,7-difenylo-1,10-fenantrolinę jako potencjalne fotouczulacze w terapii fotodynamicznej”, *65. Zjazd PTChem*, 18-21.09.2023, Toruń 2023, str. 258, [ISBN 978-83-60988-39-8]
81. R. Meenambal, T. Kruk, J. Gurgul, P. Warszyński, D. Jantas, "Polyacrylic acid (PAA) conjugated cerium oxide nanoparticles as efficient neuroprotectants against oxidative stress-induced cell damage in human neuronal-like cells", *Book of abstracts 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions*, May 29 - June 1, 2023, Kraków, Poland, str. 21
82. R. Meenambal, T. Kruk, K. Jakubowska, J. Gurgul, K. Szczepanowicz, M. Szczech, P. Warszyński, D. Jantas, "Effects of Eu³⁺ doping on physio-chemical properties and neuroprotective potential of PAACeO", *1st Aristotle Conference on Chemistry*, 12-15 November 2023, Thessaloniki, Greece
83. A. Micek-Ilnicka, M. Synowiec, M. Radecka "Catalytic and photo-catalytic properties of heteropolyacid-TiO₂ materials", *Book of Abstracts, LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, IKiFP PAN, Kraków 2023*, str. 27 [ISBN 978-83-60514-36-8]
84. A. Micek-Ilnicka, M. Synowiec, M. Radecka, P. Niemiec, R. Tokarz-Sobieraj "Photo-thermo-catalytic properties of heteropolyacid-TiO₂ systems", *Book of Abstract. 15th European Congress on Catalysis, EuropaCat2023*, 27.08-01.09.2023, Prague 2023, str. 1599
85. A. Michna, P. Batys, D. Lupa, A. Pomorska, M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Adsorption kinetics of fibroblast growth factor 21 on various interfaces: modelling and experimental studies" *Book of Abstracts, 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023)*, 3-8.09.2023, Naples , Italy, str. 570
86. R. Miller, S.B. Aidarova, E.V. Aksenenko, G. Gochev, A. Javadi, T. Kairaliyeva, M. Karbaschi, N.M. Kovalchuk, V.I. Kovalchuk, M.E. Leser, L. Liggieri, G. Loglio, M. Lotfi, A.V. Makievski, N.O. Mishchuk, N. Mucic, F. Ravera, A.A. Sharipova "Peculiarities in studies of dynamic interfacial properties with single drops and bubbles – pioneering inputs by the late Valentin Fainerman"; *Book of Abstracts, 9th Bubble and Drop Conference*, 11-16.06.2023, Lublin, Poland, str. 12
87. E. Młyńczak, I. Aguilera, Y. Mokrousov, L. Plucinski, S. Blügel, C.M. Schneider "New insights into the intrinsic anomalous Hall effect from Fe(001) angle resolved photoemission", *Abstracts. The European Conference Physics of Magnetism 2023*, June 2023 Poznań, 2023, str. 64

88. E. Młyńczak, G. Bihlmayer, M. Szczepanik, T. Sobol, K. Freindl, J. Korecki, N. Spiridis, "Surface state on Fe(001)/Au(001) investigated by high resolution angle-resolved spectroscopy", Abstract book, 36th European Conference on Surface Science, Faculty of Physics and Applied Informatics of University of Lodz, Lodz 2023, str. 362
89. J. Mokrzycki, M. Fedyna, D. Duraczyńska, M. Marzec, R. Panek, W. Franus, T. Bajda, R. Karcz "Bimetaliczne układy Cu/Mn osadzone na mezoporowatych krzemianach typu MCM-41 wytworzonych z popiołów lotnych jako katalizatory spalania toluenu", Jubileuszowa konferencja z okazji 55-lecia Zakładu Fizyki Chemicznej Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, Fizykochemia układów złożonych 22–23.06.2023, Wydział Chemii Uniwersytet Jagielloński, p. 54 [ISBN: 978-83-968701-1-7]
90. M. Morga, P. Batys, D. Kosior, P. Bonarek, A. Harmat, Z. Adamczyk, J. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi "pH-tunable Properties of Polypeptides Monolayers: Experimental Studies and MD Modeling", Book of Abstracts. 37th European Colloid & Interface Society (ECIS 2023), 03-08.09.2023, Italy, Naples, str. 256
91. M. Morga, A. Harmat, P. Bonarek, M. Sammalkorpi, J. Lutkenhaus, P. Batys, "Kontrolowanie Właściwości Filmów Polipeptydowych za Pomocą pH", Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, 16 - 20.04.2023, Lublin, Polska, str. 26
92. P. Niemiec, D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, "Oddziaływanie wybranych jonów metali szlachetnych z heteropolikwasem fosforowolframowym i fosfomolibdenowym", Book of Abstracts XV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 22-24.03.2023, IkiFP PAN, Kraków 2023, str. 18, [ISBN 978-83-60514-36-8]
93. M. Oćwieja, A. Barbasz, O. Kowalska, P. Gnacek, P. Niemiec, D. Duraczyńska, "Electrokinetic properties and biological activity of novel conjugates of chlorpromazine with gold nanoparticles" Book of Abstracts. Recent Achievements in Nanotechnology, 28.05-01.06.2023, Białystok, str. 48
94. G. Oleksy, A. Sekuła, K. Krämer, I. Aleksic, M. Szaleniec, J. Heider, A. Pierik, "Unraveling the benzylsuccinate synthase catalytic properties: modeling vs the experimental approach" 16th International Symposium on Biocatalysis & Biotransformations Biotrans 2023, La Rochelle 25-29.06.2023, N°1292
95. A. Pacuła, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, P. Pietrzyk, D. Duraczyńska "Materiały węglowe otrzymane metodą CVD z acetonitrylu w obecności porowatego podłoża powstałego z podwójnych warstwowych wodorotlenków o różnym składzie chemicznym"; Krakowska Konferencja Węglowa Krak-C, 25-26.05.2023, Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, Książka abstraktów, Wydział Chemii UJ, Kraków 2023, str. 15
96. A. Pacuła, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, P. Pietrzyk, D. Duraczyńska "The composites of N-doped carbon materials and iron species – synthesis, characterization and evaluation in oxygen reduction reaction", 15th European Congress on Catalysis EuropaCat2023, 27.08–1.09.2023, Praga, Rep. Czeska, ELE-P-021 str. 978
97. A. Pacuła, J. Gurgul, R. P. Socha, M. Ruggiero-Mikołajczyk, B. D. Napruszewska, P. Pietrzyk, D. Duraczyńska, G. Mordarski "Electrocatalytic performance of the composites containing N-doped carbon nanotubes and iron nanoparticles in oxygen reduction reaction", 15th European Congress on Catalysis EuropaCat2023, 27.08–1.09.2023, Praga, Rep. Czeska, ELE-P-020, str. 977

98. A. Pacuła, A. Micek-Ilnicka, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska, P. Pietrzyk "Katalityczna konwersja n-butanolu w obecności $H_3PW_{12}O_{40}$ osadzonego na porowatych węglach o różnej morfologii ziaren", Book of abstracts 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, 18-22.09.2023 Toruń, str. 641 [ISBN 978-83-60988-39-8]
99. A. Pacuła, A. Micek-Ilnicka, P. Pietrzyk, M. Ruggiero-Mikołajczyk, R.P. Socha, J. Gurgul, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska "N-doped carbon materials – synthesis, characterization and evaluation as supports for heteropolyacid", Book of abstracts. LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 22-24.03.2023 Kraków, Polska, str. 25 [ISBN 978-83-60514-36-8]
100. A. Pacuła, M. Oćwieja, M. Sadowska, P. Nowak, "Photocatalytic performance of metal-TiO₂ composites obtained via deposition of noble metal nanoparticles on commercial TiO₂" Book of Abstracts Book of Abstracts XV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 22-24.03.2023, IkiFP PAN, Kraków 2023, str. 65, [ISBN 978-83-60514-36-8]
101. A. Pajor-Świerzy, D. Duraczyńska, A. Kamyshny, K. Szczepanowicz "Conductive coatings based on nickel@silver core@shell nanoparticles sintered at low temperatures" Book of Abstracts 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Kraków, Polska, 26-29.09.2023, str. 69
102. A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski, P. Sobik, A. Kamyshny, K. Szczepanowicz "The printed conductive coatings based on nickel@silver core@shell NPs for the fabrication of modern electronics" Book of Abstracts 37th European Colloid and Interface Society Conference, Neapol, Włochy, 3–8.09.2023, str. 178
103. A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski, A. Sypień, K. Szczepanowicz "UV-Vis sintering method for ink based on Ni@Ag core@shell nanoparticles on the flexible substrate" Book of Abstracts NanoTech Poland 2023, Poznań, Polska, 14-16.06.2023, str. 41
104. H. Pálková, M. Zimowska, Ľ. Jankovič, H. Bujdaková, "Immobilization of metal nanoparticles on organo-modified layered silicates", Book of abstracts - Design of Advanced Inorganic Materials - Workshop on the occasion of 70th anniversary of the institute of inorganic Chemistry SAS, 3- 4 May 2023, Smolenice, Slovakia, str. 29. [ISBN 978-80-973578-7-0]
105. T. Pańczyk, K. Nieszporek, "Wytwarzanie powierzchni zdegradowanego polietylenu. Badanie przy użyciu dynamiki molekularnej", X Konferencja naukowa – Innowacje w Praktyce, Arena Lublin, 15-16.06.2023, Centrum Innowacji Naukowo-Edukacyjnych, Lublin 2023, str. 41 [ISBN 978-83-943796-9-8]
106. T. Pańczyk, P. Wolski, "A Smart Carrier of Carmustine Anticancer Drug. Properties And Mechanism of Action Predicted by Molecular Simulations", 4th Global Summit on Catalysis & Chemical Engineering, 13-14.04.2023, Rome, Italy [ISBN 981-21-486012-2-1]
107. T. Pańczyk, P. Wolski, K. Nieszporek, "Niekanoniczne formy DNA w klasycznych polach siłowych", Book of abstracts, FGF – Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, 16-20.04.2023, Lublin, str. 111
108. T. Pańczyk, P. Wolski, K. Nieszporek, "Release of selected anticancer drugs from the internal space of carbon nanotubes functionalized by DNA fragments analyzed by means of molecular dynamics ", Book of Abstracts, The 23th International Conference on the Science & Applications of Nanotubes and Low-Dimensional Materials, Arcachon near Bordeaux, France 4-9.06.2023

109. N. Piergies, D. Święch, M. Oćwieja, C. Paluszkiwicz, M.W. Kwiatek "Nanospectroscopy imaging of the molecule/metal interaction" Book of Abstracts. 12th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, Kraków, 2023, str. 88
110. W. Plazinski, V. Lutsyk "Multiscale computational approaches to study the solution structure of saccharides", Abstract Book, The 21th European Carbohydrate Symposium, Eurocarb 21, Paris, 9-13.07.2023, P205
111. Š. Pok, T. Rijavec, D. Pawcenis, M. Saad, M. Bucki, S. Bujok, S. Antropov, Ł. Bratasz, K. Kruczała, I. Kralj Cigić, M. Strlič "PVCare: Preventive Conservation Strategies for Poly(vinyl chloride) Objects", Book of Abstracts. 1st Conference of the Slovenian Node of the European Research Infrastructure for Heritage Science, E-RIHS Slovenia, Ljubljana 2023, str. 87 [ISBN 978-961-7078-41-1]
112. M. Polak, A. Pajor-Świerzy, M. Naworyta, K. Szczepanowicz "Badanie właściwości tuszów na bazie nanocząstek metali do procesu wytwarzania przewodzących materiałów" III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Blżej Chemii” Kraków, 07-08.01.2023, książka abstraktów str. 103
113. M. Polak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Investigation of the properties of inks based on nickel-silver core-shell nanoparticles for the fabrication of conductive materials", 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Kraków, Polska, 26-29.09.2023, Book of Abstracts str. 67
114. M. Polak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Wpływ właściwości tuszów na bazie nanocząstek typu „core-shell” nikiel-srebro na procesie wytwarzania przewodzących powłok" XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju” Lublin, 23-26 marca 2023 r, Abstrakty str. 156-157
115. A. Pomorska, A. Michna, D. Lupa, J. Odrobińska-Baliś, Sz. Zapotoczny, Z. Adamczyk „Formation of Modified Chitosan/Carrageenan Multilayers at Silica” Book of Abstracts pdf., 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023), 3-8.09. 2023, Naples , Italy, str. 18
116. K. Poznańska, A. Hola, A. Janas, M. Strojcki, R. Kozłowski, M. Mecklenburg, L. Fuster-López, P. Kékicheff, D. Favier, C. Krarup Andersen, M. Scharff, Ł. Bratasz “Właściwości mechaniczne farb olejnych i temperowych”, Book of Abstracts, Future of the Past - Conference on Innovative Research and Preservation of Cultural Heritage, Toruń, 14-15.06.2023
117. J. Prajsnar, R. Bugno, A. Bojarski, K. Stępień, M. Guzik, "Polyhydroxyalkanoates – biodegradable and biocompatible polymers produced by environmental bacteria", Book of Abstracts, Polymers/Composites/3Bs Materials 2023 Joint Intl. Conference, Bangkok, Tajlandia, 13-28.02.2023, str. 56
118. J. Prajsnar, M. Tataruch, R. Budno, B. Jachimska, M. Guzik, A.J. Bojarski "Polyhydroxyalkanoates (PHA) as a source of chiral synthons for the production of new drugs.", Modern polymeric materials for environmental applications : 8th international seminar including special session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications' Vol. 8, iss. 2 / ed. by Krzysztof Pielichowski ; Cracow University of Technology. — Kraków : Department of Chemistry and Technology Polymers. Cracow University of Technology, 2023. — str. 127–133, [ISBN 978-83-966714-0-0]
119. M. Rak, T. Kruk, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, „Polielektrolitowe nanonośniki substancji neuroprotektcyjnych", Book of abstracts XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, 23-26.03.2023, Lublin, Polska, str. 148-149 [ISBN 978-83-67670-09-8]

120. M. Rak, K. Łęgowski, T. Kruk, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, „Polielektrolitowe nanonośniki substancji neuroprotektoryjnych”, Book of abstracts III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Blżej Chemii”, 07-08.01.2023, Kraków, Polska, str. 106.
121. K. Rakowski, P. Mulheran, K. Kubiak-Ossowska, B. Jachimska "Badanie wpływu fosforylacji na mechanizm adsorpcji białka Tau na powierzchni modelowych błon komórek nerwowych", Book of Abstracts, Nano(&)BioMateriały – od teorii do aplikacji 2023, Toruń, Polska 2023, str. 50 [ISBN 978-83-231-4215-7]
122. K. Rakowski, P. Mulheran, K. Kubiak-Ossowska, B. Jachimska "Effect of Tau protein phosphorylation on the process of its adsorption on the neuronal membrane", Book of Abstracts, 5th International Wrocław Scientific Meeting, Wrocław, Polska 19-21.10.2023, str. 41 [ISSN 2451-2680]
123. K. Rakowski, P. Mulheran, K. Kubiak-Ossowska, B. Jachimska "Effect of Tau protein phosphorylation on the process of its adsorption on the neuronal membrane", Book of Abstracts, ACS FALL 2023 - Harnessing the Power of Data, San Francisco, USA 2023,
124. M. Regulska, M. Prochner, M. Leśkiewicz, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, A. Basta-Kaim, W. Lasoń, P. Warszyński "In vitro analysis of cytotoxicity and neuroprotective potency of theranostic nanocarriers for drug delivery in CNS disorders", Book of abstracts 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, May 29 - June 1, 2023, Kraków, Poland, str. 87
125. T. Rijavec, M. Šubic, D. Pawcenis, M. Saad, K. Gorecki, M. Bucki, S. Bujok, S. Antropov, Ł. Bratasz, K. Kruczała, I. Kralj Cigić, M. Strlič "PVC: Modelling of Decay Processes for Improved Preventive Conservation", Book of Abstracts. BACK, NOW, AND THEN 2023 Understanding Dieter Roth's POeMETRIE series & the Age of Plastics Bridging Science and Art, Academy of Fine Arts, Vienna 2023, str. 22
126. S. Ruiz-Gomez, P. Morales-Fernández, C. Fernandez-Gonzalez, C. Abert, L. Danesi, M. Foerster, M. Ángel Nino, A. Mandziak, D. Wilgocka-Ślęzak, Ewa Madej, M. König, S. Seifert, A.H. Rodríguez, A. Fernandez-Pacheco, C. Donnelly "Tailoring the energy landscape of domain walls with curvature" Joint European Magnetic Symposia (JEMS2023) 27th Aug – 1st Sep 2023 in Madrid, Spain, str. 705
127. D. Rutkowska-Zbik, R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, „DFT studies on Cu_n/TiO₂ (n=1-6) system for water splitting”, COST 18234 Meeting “Development of nanocrystal materials through computational modeling” 17-19.07.2023, Haifa, Izrael, str. 12
128. M. Saad, K. Kruczała, M. Bucki, K. Górecki, S. Bujok, Ł. Bratasz "Investigating Degradation of Poly(vinyl chloride) by Spectroscopic Methods", Book of Abstracts. International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS12), Faculty of Chemistry Jagiellonian University, Kraków 2023, str. 32
129. A. Senderowski, D. Rutkowska-Zbik, A. Mendez, I. Lampre, H. Remita „TD-DFT studies on photochemical properties of the platinum carbonyl Chini clusters”, Book of Abstracts. XV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023, I KiFP PAN, Kraków, 2023, str. 72, [ISBN 978-83-60514-36-8]
130. M. Seta, A. Gondek, A. Cudnoch-Jędrzejewska, P. Włodarski, S. Skibiński, E. Cichoń, A. Zima, M. Guzik "Different types of ceramic-polymer scaffolds as potential implants for bone regeneration", Modern polymeric materials for environmental applications: 8th international seminar including special session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications' Vol. 8, iss. 2 / ed. by Krzysztof Pielichowski ; Cracow University of Technology.

- Kraków : Department of Chemistry and Technology Polymers. Cracow University of Technology, 2023. — str. 171-180, [ISBN 978-83-966714-0-0]
131. K. Skibińska, R. Knura, S. Sahayaraj, Z. Starowicz, G. Putynkowski, R.P. Socha "Semiconductor and optical properties of Ge-doped ZnO thin films grown by ALD method", Abstract Book, 36th European Conference on Surface Science ECOSS, 28.08-01.09.2023, Łódź, str. 67
 132. S. Skibiński, J. Czechowska, E. Cichoń, P. Pańtak, M. Guzik, P. Szymczak, A. Zima "Novel polyhydroxyalkanoate blends as coatings of beta tricalcium phosphate scaffolds", ICACC2023: 47th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites, 22-27.01.2023, Daytona Beach, Florida, USA, str. 74
 133. S. Skibiński, J. P. Czechowska, E. Cichoń, P. Pańtak, A. Ślósarczyk, M. Guzik, A. Zima "Composite scaffolds based on beta tricalcium phosphate and bacteria-derived polyhydroxyalkanoates", Modern polymeric materials for environmental applications: 8th International Seminar including Special Session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications' Vol. 8, iss. 2 / ed. by Krzysztof Pielichowski ; Cracow University of Technology. — Kraków: Department of Chemistry and Technology Polymers. Cracow University of Technology, 2023. — str. 187–196, [ISBN 978-83-966714-0-0]
 134. R. Socha, A. Zięba, M. Ciężkowska, K. Kałahurska, D. Wojcieszczak, W. Andrysiewicz, R. Knura, K. Skibińska, P. Kasza, M. Grodzik, B. Bażanów, M. Krzan "Kompozytowe włókniny biobójcze na osnowie polipropylenu", 65. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 18-22.09.2023, Toruń, Książka abstraktów, str. 411 [ISBN 978-83-60988-39-8]
 135. K. Sofińska, S. Seweryn, K. Skirlińska-Nosek, J. Barbasz, P. Batys, A. Cernescu, D. Ghosh, R. Riek, N. Wilkosz, M. Szymoński, E. Lipiec, "Nanospectroscopy for Revealing Secrets of Protein Aggregation in Alzheimer's Disease", Book of Abstracts, XII Workshop on Applications of Scanning Probe Microscopy STM/AFM 2023, November 29 – December 3, 2023, Zakopane, Poland, str. 72
 136. N. Spiridis, J. Wojas, N. Kwiatek, E. Madej, K. Freindl, D. Wilgocka -Ślęzak, J. Korecki, "Gold nanoparticles on periodic self-organized iron oxide templates", Abstract book, 36th European Conference on Surface Science 28.08.2023-01.09.2023, Faculty of Physics and Applied Informatics of University of Lodz, Lodz 2023, str. 310
 137. K. Stachurski, N. Łopuszyńska, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, K. Jasiński, T. Didriksen, Y. Yang, A. Lind, P. Warszyński, W.P. Węglarz "Investigation of MRI Contrasting Properties of Potential Theranostic Nanocarriers", Book of abstracts 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, May 29 - June 1, 2023, Kraków, Poland, str. 89
 138. M. Szaleniec, M. Głanowski, P. Wójcik, A. Wojtkiewicz, „Dehydrogenazy 3-ketosteroidowe – czyli jak wyjaśniliśmy 50-letnią naukową zagadkę”, Book of Abstracts. XIV Międzynarodowa Konferencja Naukowa „Horyzonty Nauki” 12-13.06.2023, str. 14
 139. M. Szaleniec, M. Głanowski, A. Wojtkiewicz, A. Winiarska, „Eksperyment bez teorii jest ślepy, teoria bez eksperymentu jest jedynie intelektualną zabawą”, Book of abstracts. 65 Zjazdu Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Toruń 2023, S09 WS06, str. 498. [ISBN 978-83-60988-39-8]
 140. M. Szczęch, H. Genç, I. Cicha, K. Szczepanowicz "Nanocarriers for cardiovascular drug delivery: Development and initial evaluation of biocompatibility", Congres Documentation, 11th International Congress Nanotechnology in Medicine & Biology BIONANOMED 2023, Graz Austria, 12-14.04.2023

141. M. Szczęch, H. Genç, I. Cicha, K. Szczepanowicz "Polymeric nanocarriers for cardiovascular drug delivery: Development and initial evaluation of biocompatibility", Book of abstracts 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, May 29 - June 1, 2023, Kraków, Poland, str. 112
142. M. Szczęch, H. Genç, I. Cicha, K. Szczepanowicz "Polymer-based nanocarriers for cardiovascular drug delivery: development and initial evaluation of biocompatibility" Book of Abstracts 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4) September 26th – 29th, 2023, Krakow, Poland, str. 79
143. M. Szczęch, A. Hinz, M. Bzowska, and K. Szczepanowicz "Nanoemulsion Templating for Preparing Drug Nanocarriers", Book of Abstracts. 9th Bubble and Drop Conference, 11-16.06.2023, Lublin, Polska, str. 59
144. M. Szczęch, T. Kruk, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W. Węglarz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz, "Layer-by-layer as a method of functionalization of drug delivery systems", Book of abstracts 13th International Symposium on Polyelectrolytes, 28 August - 1 September 2023, Prague, Czechia, str. 166
145. M. Szczęch, T. Kruk, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz "Sequential adsorption of charged nanoobjects as a method of functionalization of drug delivery systems" Book of abstracts 65. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, 18-22 września 2023, Toruń, Polska str. 136
146. M. Szczęch, T. Kruk, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz, "Sequential adsorption of charged nanoobjects as a method of formation of multifunctional theranostic systems", 11th International Congress Nanotechnology in Medicine & Biology BIONANOMED 2023, 12-14 April 2023, Graz, Austria
147. M. Szczęch, T. Kruk, N. Łopuszyńska, K. Stachurski, K. Jasiński, W.P. Węglarz, P. Warszyński, K. Szczepanowicz, "Synthesis and characterization of polymer-based theranostic nanoparticles containing carnosic acid", Book of abstracts 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, May 29 - June 1, 2023, Kraków, Poland, str. 19
148. M. Szczęch, M. Procner, M. Leśkiewicz, M. Regulska, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński and K. Szczepanowicz "Polymeric-based theranostic nanocarriers to central nervous system therapies" 11th International Congress Nanotechnology in Medicine & Biology BIONANOMED 2023, Graz Austria, 12-14 April 2023
149. M. Szczęch, M. Procner, N. Łopuszyńska, M. Leśkiewicz, M. Regulska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński and K. Szczepanowicz "Functional polymeric nanocarriers to the central nervous system", Book of Abstracts 37th European Colloid and Interface Society Conference, 3–8.09.2023, Neapol, Włochy, str. 512
150. M. Szczęch, M. Procner, N. Łopuszyńska, M. Regulska, M. Leśkiewicz, K. Jasiński, K. Stachurski, B. Pomierny, W.P. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński and K. Szczepanowicz "Polymer-based theranostic nanocarriers for the central nervous system disorders" Book of Abstracts 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4) September 26th – 29th, 2023, Krakow, Poland, str. 78
151. M. Szczęch, M. Procner, N. Łopuszyńska, M. Leśkiewicz, M. Regulska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, W. Lasoń, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Theranostic polymeric nanocarriers for drug delivery in central nervous system disorders" Book of abstracts 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, Toruń, 18-22 września 2023, str. 194

152. J. Szechyńska, A. Kamińska, P. Komorek, B. Jachimska, "The analysis of the influence of selected factors on changes in α -synuclein structure" Book of abstract, Advances in Clinical and Experimental Medicine, 5th International Wrocław Scientific Meeting, 19-21.10.2023, Wrocław, Poland, str. 26 [ISSN 2451-2680]
153. R. Szostecki, T. Kruk, K. Szczepanowicz, „Synteza i charakterystyka nanocząstek miedzi", Book of abstracts XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, 23-26 marca 2023, Lublin, Polska, str. 83 [ISBN 978-83-67670-09-8].
154. M. Szota, B. Jachimska „Dendrymer G4.0 PAMAM jako efektywny nanonośnik leków przeciwnowotworowych”, Conference Materials, V Interdyscyplinarna Konferencja Nano (&) BioMateriały - od teorii do aplikacji, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Toruń, 2023, str. 49 [ISBN 978-83-231-4215-7]
155. L. Szyk-Warszyńska, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Lateral mobility of polymeric core-shell nanocapsules in agarose gels", Book of Abstracts 37th European Colloid and Interface Society Conference, 3–8.09.2023, Neapol, Włochy, str. 618
156. A. Szymaszek-Wawryca, U. Díaz, D. Duraczyńska, B. Samojeden, M. Motak "One-pot synthesized Fe-ITQ-2 as catalyst for selective catalytic reduction of nitrogen oxides with ammonia – the effect of iron loading", 15th European Congress on Catalysis, EuropaCat2023, 27.08–1.09.2023, Prague, The Czech Republic, EXH-P-056
157. A. Szymaszek-Wawryca, P. Summa, U. Díaz, D. Duraczyńska, B. Samojeden, M. Motak "NH₃-SCR catalytic performance of natural clinoptilolite modified with hydrotalcite-like phase", 15th European Congress on Catalysis, EuropaCat2023, 27.08–1.09.2023, Prague, The Czech Republic EXH-P-044
158. E. Świerkosz, M. Ślęzak, H. Nayyef, A. Klimeczek, M. Szpytma, W. Janus, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zajac, A. Kozioł-Rachwał, and T. Ślęzak „Out of plane antiferromagnetic spins induced by reorientation transition in NiO(111)/Co bilayers”, Abstracts. The European Conference Physics of Magnetism 2023 (PM'23), Poznań 2023, str. 215
159. R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, P. Niemiec, D. Rutkowska-Zbik, „Theoretical Studies on Catalytic Systems for Light-driven Processes for Energy Applications”, Book of Abstracts, 1st SUNCOCAT Workshop on Solar-driven Chemistry, 15.06.2023, Warszawa, Poland, str. 11
160. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Zbik, "Właściwości Pt/Pd wbudowanych w strukturę heteropolikwasów o strukturze Keggina – obliczenia DFT", Book of abstract 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, 18-22.09.2023, Toruń 2023 str. 519, [ISBN 978-83-60988-39-8]
161. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Zbik, P. Niemiec, "Kompleksy Keggin-metal przejściowy jako jednoatomowe katalizatory w reakcjach fotokatalitycznych - Obliczenia DFT", Book of abstract 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, 18-22.09.2023, Toruń 2023 str. 648, [ISBN 978-83-60988-39-8]
162. M. Wasilewska, A. Michna, A. Pomorska, K. Wolski, Sz. Zapotoczny, T. Gerecsei, E. Farkas, I. Szekacs, R. Horvath „Tracking of cell adhesion on macroion layers” Book of Abstracts, 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023), 3-8.09. 2023, Naples , Italy, str. 143

163. A. Wiertel-Pochopień, M. Borkowski, P. Batys, P.B. Kowalczyk, J. Zawala „Właściwości pieniające mieszaných roztworów kationowych i niejonowych surfaktantów o różnej aktywności powierzchniowej”, *Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne*, 16-20.04.2023, Lublin, Polska, str. 31
164. A. Wiertel-Pochopien, J. Zawala, „Dynamiczna warstwa adsorpcyjna, a stabilność filmów zwilżających”, *Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne*, 16-20.04.2023, Lublin, Polska, str. 29
165. A. Winiarska, F. Ramírez-Amador, G. Pacek, I. Aleksic, D. Hege, Y. Gemmecker, S. Prinz, G. Hochberg, J. Heider, J. Michael Schuller, M. Szaleniec, “Tungsten aldehyde oxidoreductase/hydrogenase forms an enzymatic decorated protein nanowire”, 16th International Symposium on Biocatalysis & Biotransformations Biotrans 2023, La Rochelle 25-29.06.2023, N°668
166. A.M. Wojtkiewicz, P. Wójcik, M. Tataruch, T. Janeczko, M. Szaleniec „Bakteryjne oksydoreduktazy do zastosowania w produkcji farmaceutyków”, II Ogólnopolska Konferencja Naukowa Bioaktywne związki pochodzenia naturalnego, Trzebnica 9-10.10.2023, str. 41 [ISBN 978-83-951163-2-2]
167. M. Zaleski, A. Pajor-Świerzy, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Core@shell Nanowires for Conductive Inks and Pastes", Book of abstract, 9th Bubble and Drop Conference, Lublin, Polska, 11-16.06.2023, str. 54
168. M. Zaleski, A. Pajor-Świerzy, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Core@shell Nanowires for Conductive Inks and Pastes", Book of abstract 37th European Colloid and Interface Society Conference, Naples, Italy, 3-8.09.2023, str. 96
169. J. Zawala, J. Miguet, P. Rastogi, O. Atasi, M. Borkowski, B. Scheid, G.G. Fuller, “Wpływ dynamicznej warstwy adsorpcyjnej na stabilność filmów pianowych – badania ilościowe przy użyciu Dynamic Fluid-film Interferometry”, *Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne*, 16-20.04.2023, Lublin, Polska, str. 46
170. M. Zimowska, J. Gurgul, M. Mosiałek, K. Łątka „Structure evolution of perovskite-type $\text{YFe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{O}_3$ triggered by the calcination temperature”, LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne 22-24.03.2023 Kraków, str. 80 [ISBN 978-83-60514-36-8]
171. M. Zimowska, M. Śliwa, H. Palkova, J. Gurgul, Robert P. Socha „Microwave-activated hybrid composites based on clay minerals for CO_2 capture – SEM/ESD and spectroscopic studies”, Book of Abstracts XV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 22-24.03.2023, IKiFP PAN, Kraków 2023, str. 79 [ISBN 978-83-60514-36-8]
172. M. Zimowska, M. Śliwa, H. Pálková, R. P. Socha, P. Niemiec, E. Scholtzova “Functionalized hybrid materials based on clay minerals for CO_2 sorption”, Scientific Research Abstracts of EUROCLAY 2023 International Conference of European Clay Groups Association, Bari, Italy 24-27 July 2023; Vol. 14, str. 324, 2023, [ISSN 2464-9147] (Online)
173. S. Zimowski, M. Zimowska, J. Krupa, “Badania odporności na zużycie twardych powłok zwiększających trwałość ostrzy narzędzi skrawających”, [Wear resistance of hard coatings increasing durability of cutting tool blades], Materiały konferencyjne XLI JSzT Ogólnopolskiej Konferencji, Jesienna Szkoła Tribologiczna 2023, 05-08.09.2023, Łańcut, [Dokument elektroniczny, Dane tekstowe: Politechnika Rzeszowska w Rzeszowie, 2023]

KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]

1. LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne „LV Polish Annual Conference on Catalysis, 22-24 marca 2023, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2023, str. 1-102, [ISBN 978-83-60514-36-8]

FUNKCJE EDYTORSKIE

POWOŁANIE NA STANOWISKO REDAKTORA

- B. Jachimska - Editorial Board, International Journal of Molecular Sciences, Wydawca MDPI, ISSN 1420-3049
- B. Jachimska - Editorial Board, Innovation & Impact, ISSN 2450-4408

POWOŁANIE NA CZŁONKA KOMITETU REDAKCYJNEGO

- D. Kharytonau - Review Editor in Electrochemistry, Frontiers in Chemistry, ISSN 2296-2646

EDYTORSTWO MONOGRAFII

1. Special Issue " Biomaterials Based on Calcium Phosphates and Their Modifications" w "Molecules" (A. Zima, E. Cichoń, J. Czechowska, *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 1420-3049
2. Special Issue "Polyelectrolytes and Polyelectrolyte Complexes: Ionic Macromolecule-Based Functional Materials" w "International Journal of Molecular Sciences" (B. Jachimska *Guest Ed.*), Wydawca MDPI, ISSN 1422-0067
3. Special Issue "Mechanisms and Kinetics of Interactions of Biomolecules at Interfaces" w "Biomolecules" (M. Wasilewska, A. Michna, M. Morga, A.G. Cherstvy, *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 2218-273X
4. Special Issue " Mechanisms and Kinetics of Interactions of Biomolecules at Interfaces II" w "Biomolecules" (M. Wasilewska, A. Michna, M. Morga, *Guest Ed.*) Wydawca MDPI, ISSN 2218-273X
5. Special Issue " New Anticancer Agents Based on Natural Products" w "Molecules" (M. Mizerska-Kowalska, W. Płaziński, S. Sowa, R. Paluch *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 1420-3049
6. Special Issue "Nanotechnology in Modern Medicine" w " International Journal of Molecular Sciences" (K. Szczepanowicz *Guest Ed.*), Wydawca MDPI, ISSN 1422-0067

OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ

UZYSKANE PATENTY

1. M. Guzik, W. Snaoch, D. Wnuk, J. Staroń „Zastosowanie estrów cukrowych kwasów tłuszczowych o komponencie kwasowej będącej mieszaniną monomerów uzyskanych z bakteryjnego polihydroksynonaniano - co - heptanianu do hamowania proliferacji komórek nowotworowych w leczeniu i profilaktyce chorób”, Polish Patent, Pat.243694 (14.07.2023, 02.10.2023 w W.U.P.)
2. T. Majka, E. Hebda, K. Pielichowski, M. Guzik „Sposób krystalizacji polihydroksyoktanianu z roztworu”, Polish Patent, Pat.244206 (22.09.2023, 18.12.2023 w W.U.P.)

ZGŁOSZENIA PATENTOWE

- 1 M. Niemiec, A. Gorczyca, J. Sikora, M. Komorowska, M. Guzik „Kompozycja zawierająca mieszaninę włókien celulozy i kleju celulozowego, sposób biogazowania brzezki pofermentacyjnej i zastosowanie kompozycji zawierającej włókna celulozy i klej celulozowy w procesie wytwarzania biogazu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.443737 (2023)
- 2 M. Niemiec, A. Gorczyca, J. Sikora, M. Komorowska, M. Guzik „Kompozycja zawierająca środki emulgujące zwiększająca efektywność fermentacji metanowej odpadów bogatych w tłuszczce, sposób wytwarzania biogazu w procesie fermentacji produktów bogatych w tłuszczce oraz zastosowanie kompozycji zawierającej środki emulgujące do wytwarzania biogazu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.443735 (2023)
- 3 K. Szczepanowicz, M. Szwed, A. Marczak „Sposób wytwarzania wielordzeniowego nanonośnika polielektrolitowego syntezowanego na bazie siarczanu dodecyłu sodu i wielordzeniowy nanonośnik polielektrolitowy do zastosowania do leczenia w terapii przeciwnowotworowej”, Zgłoszenie patentowe RP, P.443843 (2023)
- 4 A. Panek, P. Wójcik, M. Urbaniak, E. Kozłowska, M. Szaleniec, Ł. Stępień, T. Janeczko „1 α -hydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dion i sposób wytwarzania 11 α -hydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dionu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.444646 (2023)
- 5 A. Panek, P. Wójcik, M. Szaleniec, T. Janeczko „Sposób wytwarzania 11 α -hydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dionu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.444648 (2023)
- 6 A. Panek, P. Wójcik, M. Szaleniec, T. Janeczko „6 β ,11 α -Dihydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dion i sposób wytwarzania 6 β ,11 α -dihydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dionu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.444649 (2023)
- 7 A. Panek, P. Wójcik, M. Szaleniec, T. Janeczko „6 β ,17 α -Dihydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dion i sposób wytwarzania 6 β ,17 α -dihydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dionu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.444651 (2023)
- 8 A. Panek, P. Wójcik, M. Szaleniec, T. Janeczko „12 β ,17 α -Dihydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dion i sposób wytwarzania 12 β ,17 α -dihydroksy-pregn-1,4-dien-3,20-dionu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.444652 (2023)

Zgłoszenia patentowe publikowane w W.U.P.

1. A. Wojtkiewicz, M. Szaleniec, M. Guzik, J. Prajsnar „Sposób enzymatycznej syntezy glochidonu”, Zgłoszenie patentowe RP, P.439727
2. M. Guzik, M. Mosiałek, P. Pasierb, M. Mączka „Ogniwo glinowo - jonowe do magazynowania energii elektrycznej”, Zgłoszenie patentowe RP, P.439841

3. M. Mizerska-Kowalska, S. Sowa, B. Zdzisińska, B. Donarska, K.Z. Łączkowski, W. Płaziński „Ester diizopropylowy kwasu [1-(N-p-bromofenyloamino)]-1-(p-nitrofenylo)metyloboranatofosfonawy do zastosowania jako inhibitor neuralnej endopeptydazy”, Zgłoszenie patentowe RP, P.440633

UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH 2023

WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

- 1 J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, A. Miłaczewska, Z. Wojdyła "Computational and experimental studies on selected non-heme iron enzymes", The 6th Quantum Bio-Inorganic Chemistry Conference, 29.08-1.09.2023, Warszawa
- 2 G. Gochev "Colloidal Systems Interactions between Surfaces", Research-Educational Workshop on "Relevance of colloids and interfacial science for developing scientific and technological projects", organizer: Colloid and Surface Academy of World Academies; 13.12.2023, online
- 3 G. Gochev, D. Exerowa, B. Braunschweig, E. Schneck, R. Miller "Predicting the stability of protein foams: a case study on β -lactoglobulin", 9th Bubble and Drop Conference, 11-16 June 2023, Lublin, Poland
- 4 M. Guzik, "Polyhydroxyalkanoate – polymers from bacteria – synthesis and applications", 8th International Seminar on Modern Polymeric Materials for Environmental Applications (MPM2023) 17-19.05.2023, Krakow, Polska
- 5 M. Guzik, „Przekształcając Przemysł: Potencjał i Przyszłość Polihydroksyalkanianów (PHA)” III Naukowa Konferencja Tematyczna PKN ORLEN: "Kataliza - terażniejszość i przyszłość" 19-20.10.2023, Płock, Polska,
- 6 B. Jachimska, "Structure and function of protein corona at the nanoparticles interface" Konferencję „Copernicus Dialogues”, series titled -The Focus of Polish-Italian cooperation in the area of biomedicine, 27.10.2023, Rzym, Włochy
- 7 D. Jantas, A. Roman, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, W. Lasoń "Biosafety and neuroprotective potency of polymer-based theranostic nanoparticles containing carnosic acid", 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, 29.05-1.06.2023, Kraków, Poland
- 8 V. Kaipanchery, A. Drzewiecka-Matuszek, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, D. Rutkowska-Zbik „Badania aktywacji wiązań C-H w alkanach metodą DFT”, 65. Zjazd PTChem, 18-21.09.2023, Toruń, Polska
- 9 A. Kluza, Z. Wojdyła, T. Borowski "Experimental and Computational Studies on a Bifunctional Enzyme Hyoscyamine 6beta-hydroxylase", Modeling Interactions in Biomolecules IX, 10-14.09.2023, Prague-Pruhonice, Republika Czeska
- 10 Ł. Kuterasiński "On the application of zeolites in the manufacture of ANFO-based explosives" Bioref Winter School, Cracow University of Technology, 27.02.-3.03.2023, Kraków, Polska
- 11 D. Rutkowska-Zbik „Eksperymentalne i teoretyczne badania transformacji alkanów – możliwości badawcze i aparaturowe w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN”, Konferencja ORLEN „Kataliza – terażniejszość i przyszłość” 19-20.10.2023, Płock, Polska
- 12 M. Strojcki "Principles of Acoustic Emission" Changing Climate Management Strategies Sustainable Collection Environments and Monitoring Object Response, National Gallery of Victoria, 7-10.08.2023, Melbourne, Australia

- 13 M. Szaleniec, M. Glanowski, A. Wojtkiewicz, A. Winiarska, „Eksperyment bez teorii jest ślepy, teoria bez eksperymentu jest jedynie intelektualną zabawą”, Zjazd PTChem, 18-21.09.2023, Toruń, Polska
- 14 M. Szaleniec, M. Glanowski, P. Wójcik, A. Wojtkiewicz, „Dehydrogenazy 3-ketosteroidowe – czyli jak wyjaśniliśmy 50-letnią naukową zagadkę”, XIV Międzynarodowa Konferencja Naukowa „Horyzonty Nauki” 12-13.06.2023
- 15 K. Szczepanowicz, M. Szczęch, P. Warszyński, "Teranostyczne nośniki leków - wyzwania fizykochemiczne", FGF 2023, 16-20.04.2023, Lublin, Polska
- 16 M. Szczęch, T. Kruk, N. Łopuszyńska, K. Stachurski, K. Jasiński, W.P. Węglarz, P. Warszyński, K. Szczepanowicz, "Synthesis and characterization of polymer-based theranostic nanoparticles containing carnosic acid", 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, 29.05 -1.06.2023, Kraków, Poland
- 17 R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, P. Niemiec, D. Rutkowska-Zbik, „Theoretical Studies on Catalytic Systems for Light-driven Processes for Energy Applications”, 1st SUNCOCAT Workshop on Solar-driven Chemistry, 15.06.2023, Warszawa, Poland
- 18 R. Tokarz-Sobieraj, P. Niemiec, D. Rutkowska-Zbik, „DFT Studies on Interactions Between Heteropolyacids, Noble Metal Ions, and TiO₂ support”, 244th ECS Meeting, 8-12.10.2023 Geteborg, Szwecja
- 19 P. Warszyński, "Various aspects of surface charge and zeta potential relationship in the area of nanocrystals, colloids, emulsions and foams", 36th European Conference on Surface Science, 28.08 – 1.09.2023, Lodz, Poland
- 20 P. Warszyński, „Nowe metody dostarczania leków do terapii chorób neurodegeneracyjnych – nanokapsułki teranostyczne” IV Kongres PTSF, 14-19.09.2023, Kraków, Polska
- 21 A. Winiarska, G. Oleksy, I. Aleksić, K. Kräme, D. Hege, Y. Gemmecker, G. Hochberg, S. Prinz, J. M. Schuller, P. Kalimuthu, J. Cotelesage, G. N. George, P. V. Bernhardt, J. Heider, M. Szaleniec “Mining anaerobic bacteria for unusual enzymes – experiment and modelling”, 5th International meeting on Trends in Enzyme Catalysis, Merging theory and experiment TrEnCa, 30.11-1.12.2023 Benicassim, Spain
- 22 A.M. Wojtkiewicz, P. Wójcik, M. Tataruch, T. Janeczko, M. Szaleniec „Bakteryjne oksydoreduktazy do zastosowania w produkcji farmaceutyków”, II Ogólnopolska Konferencja Naukowa Bioaktywne związki pochodzenia naturalnego, 9-10.10.2023 Trzebnica

REFERATY I KOMUNIKATY

- 1 G. Antczak, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, B. Gołyszny, N. Spiridis "Bi-molecular layers of CoPc and F₁₆CuPc on Ag(100): how the structure factor can be used to identify chiral domains”, XII Workshop on Applications of Scanning Probe Microscopy – STM/AFM 2023, Zakopane, Poland, 29.11-03.12.2023
- 2 S. Antropov, L. Bratasz, R. Kozłowski, "Trójwymiarowa higo- mechaniczna symulacja obrazu na desce z rozwiniętą siatka spękań", AChwOZ'23, Warszawa, 01.12.2023

- 3 S. Antropov, L. Bratasz, K. Poznańska, M. Bury, "3D model of a panel painting with a developed craquelure pattern", Wood Science and Technology III, Maastricht, Holandia, 19.10.2023
- 4 J. Barbasz, "Coordinated health care and artificial Intelligence" Life Science Open Space, 2023
- 5 A. Biessikirski, M. Dworzak, S. Gotovac-Atlagić, S. Sukur, M. Pytlik, Ł. Kuterasiński „Potencjalne zastosowanie mikroporowatych dodatków węgla drzewnego w produkcji nieidealnych materiałów wybuchowych” XIII konferencja naukowo-techniczna, Ustroń, 4-6.10.2023
- 6 B. Blyzniuk, A. Dziwoki, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, E. Madej, E. Młyńczak, M. Szpytma, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, and N. Spiridis, "Magnetization reversal in Fe(001) films grown on MgO(001) by magnetic field assisted molecular beam epitaxy", 36th European Conference Physics of Magnetism 2023 (PM'23), Poznań 26-30.06.2023
- 7 S. Bujok, A. Bridarolli, M. Łukomski, Ł. Bratasz "Wpływ szybkich i wolnych zmian wilgotności względnej na obiekty wrażliwe", XXIII Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków 2023, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych UW, Warszawa 2023
- 8 M. Bury, S. Antropov, Ł. Bratasz, "Komputerowy model obrazów na płótnie", Future of the Past - Conference on Innovative Research and Preservation of Cultural Heritage, Toruń, 14-15.06.2023
- 9 M. Borkowski, D. Lupa, B. Braunschweig, G. Gochev, J. Zawała, "Synergistic foaming systems based on surface-modified magnetic nanoparticles and amino acid surfactants in destabilization of real foams in a magnetic field", 9th Bubble and Drop Conference, Lublin, Poland, 11-16.05.2023
- 10 J. Dedecek, S. Sklenak, E. Tabor, K. Mlekodaj, A. Kornas, H. Jirglova, M. Lemishka, D. Rutkowska-Zbik, "Low temperature activation of molecular oxygen for selective oxidation reactions" 5th Euro Asia Zeolite Conference, Busan, Korea, 5-8.02.2023
- 11 A. Drzewiecka-Matuszek, J. Dedecek, D. Rutkowska-Zbik, "Dioxygen Activation over Binuclear Transition Metal Centres", Modeling Interactions in Biomolecules 2023, Pruhonice, Rep. Czeska 10-14.09.2023
- 12 A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Zbik „Aktywacja tlenu cząsteczkowego na centrach bimetalicznych: badania DFT” 65. Zjazd PTChem, Toruń, Polska 18-21.09.2023
- 13 D. Gawęł, G. Gochev, G.G. Fuller, J Zawała "Differences in coalescence of surface bubbles in solutions of simple surfactant and protein" ; 9th Bubble and Drop Conference, Lublin, Poland, 11-16.06.2023
- 14 P. Gnacek, A. Barbasz, D. Ungor, A. Czyżowska, E. Csapó, J. Maciejewska-Prończuk, P. Żeliszewska, M. Oćwieja "Comparative studies on cytotoxicity of gold nanoparticles and protein-stabilized fluorescence gold nanoclusters", 8th World Congress on Recent Advances in Nanotechnology (RAN'23), Lisbon, Portugal, 23–25.03.2023
- 15 A. Gorczyca, S. W. Przemieniecki, M. Niemiec, S. Bednarz, M. Guzik. "Utilization of PHA production waste streams to plants fertilization and stimulation." 8th International Seminar on Modern Polymeric Materials for Environmental Applications (MPM2023), Krakow, Polska, 17-19.05.2023
- 16 B. Jachimska, P. Komorek, K. Rakowski, M. Szota "Conformational Stability of Bovine Serum Albumin as a Result of Interactions with Gold Surface" ACS Fall 2023, American Chemical Society National Meeting, San Francisco, 2023

- 17 J. Kaim, M. Śliwa, K. Samson, M. Zimowska, R. Kosydar, J. Podobiński, E. Lalik, M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, Ł. Kuterasiński, M. Witko, D. Rutkowska-Zbik "Gas phase conversion of furfural over Cu, Ni, and Cu-Ni systems", Sunergy Regional Meeting, Prague, The Czech Republic, 14-15.09.2023
- 18 J. Kaim, M. Śliwa, K. Samson, M. Zimowska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Podobiński, M. Witko, D. Rutkowska-Zbik „The supported Cu-Ni bimetallic catalysts for vapor phase conversion of furfuryl aldehyde” 15th European Congress on Catalysis EuropaCat2023, Praga, Rep. Czeska, 27.08–1.09.2023
- 19 V. Kaipanchery, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Zbik, “Density Functional Studies on Photocatalytic Methane Coupling over Au/TiO₂”, 3rd Momentom International Congress “Energy at the Crossroads: Accelerating innovation in the age of disruption”, Gif-sur-Yvette, Francja, 8-10.03.2023
- 20 A. Kamińska, J. Szechyńska, P. Komorek, B. Jachimska "The analysis of the influence of selected factors on changes in α -synuclein structure", 5th International Wrocław Scientific Meeting, Wrocław, 19-21.10.2023
- 21 D. S. Kharytonau, M. A. Osipenko, K. Skowron, G. Mordarski, E. Jarek, M. Zimowska, J. Ryl, P. Warszyński, "Chitosan-based Coatings for Corrosion Protection of Biodegradable Mg alloys", 35th Conference on Surface Modification Technologies, Hamburg, Germany, 18-22.09.2023
- 22 D. Kiphart, F. Stobiecki, M. Matczak, A. Mandziak, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Kuświk "Magnetic domains without domain walls in Tb/Co layered films after patterning by Ga⁺ focused ion beam" Magnetism, Interactions and Complexity: innovative ideas on spin wave dynamics and transport properties in low-dimensional materials - satellite workshop to The European Conference Physics of Magnetism 2023, Będlewo 24-28.07.2023
- 23 R. Kosydar, D. Duraczyńska, M. Sadowska, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Oćwieja “Platinum nanoparticles with various surface charge deposited on silica for hydrogenation of acetophenone”, LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 22-24.03.2023
- 24 O. Kowalska, A. Barbasz, P. Gnacek, M. Oćwieja "Biological effects induced by conjugates of neuroleptics with gold nanoparticles", 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Kraków, 2023
- 25 K. Kozak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Optymalizacja procesu wytwarzania przewodzących powłok na bazie nanocząstek o strukturze „core-shell” nikiel-srebro w niskich temperaturach spiekania" XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, Lublin, Polska, 23-26.03.2023
- 26 K. Kozak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Optimization of the fabrication process of conductive coatings based on nickel-silver core-shell nanoparticles at low sintering temperature"4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Kraków, Polska, 26-29.09.2023
- 27 K. Kruczała, M. Bucki, M. Saad, S. Bujok, Ł. Bratasz, K. Górecki, D. Pawcenis, T. Rijavec, I. Kralj Cigic, M. Strlič "Determining the correlation between chemical changes and mechanical properties of artificially aged poly(vinyl chloride)", LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 22-24.03.2023

- 28 K. Krużel, J. Odrobińska-Baliś, K. Szczepanowicz "Kapsuły o ciekłych olejowych rdzeniach jako potencjalne nośniki substancji aktywnych w leczeniu chorób eurodegeneracyjnych", XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju” Lublin, 23-26.03.2023
- 29 Ł. Kuterasiński, M. Sadowska, P. Żeliszewska, B. D. Napruszewska, M. Pytlik, A. Biessikirski „Experimental studies and thermodynamic calculations on the potential application of faujasite as an ingredient of ANFO-based explosives” 55 Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 22-24.03.2023
- 30 Ł. Kuterasiński, M. Sadowska, P. Żeliszewska, B. D. Napruszewska, M. Pytlik, A. Biessikirski „Copper-containing faujasite as a modifier of ANFO-type explosives” 9th Conference of the Federation of the European Zeolite Associations (FEZA2023), Portorož-Portorose, Slovenia, 2-6.07.2023
- 31 K. Łęgowski, T. Kruk, K. Szczepanowicz "Właściwości antyadhezyjne powłok szczepionych glikolami polietylenowymi" XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, Lublin, 23-26.03.2023
- 32 K. Łęgowski, M. Rak, T. Kruk, K. Szczepanowicz, „Antyadhezyjne właściwości filmów polielektrolitowych", III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Blżej Chemii”, Kraków, Polska 07-08.01.2023
- 33 J. Maciejewska-Prończuk, P. Żeliszewska, M. Oćwieja “Fluorescencyjne materiały warstwowe na baize nanoklasterów złota”, XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL, “Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, Lublin, 23-26.03.2023
- 34 T. M. Majka, K. Pielichowski, K. N. Raftopoulos, M. Guzik, A. Szeligowski, T. Witko, O. Zastawny, A. Kaczmarski, A. Ślósarczyk, A. Zima, E. Cichoń, S. Skibiński, J. Czechowska "Selected properties of UV-aged polyhydroxybutyrate/ β -tricalcium phosphate [P (3HB)]/ β -TCP composites" 8th International Seminar including Special Session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications', Kraków, 17-19.05.2023
- 35 D. Matyszewska, P. Fontaine, P. Batys, M. Zaborowska, "Physicochemical description of the interactions of drugs used in the treatment of chronic obstructive pulmonary disease (COPD) with model lung surfactants", 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023), Naples, Italy, 3-8.09.2023
- 36 O. Mazuryk, E. Janczy-Cempa, I. Gurgul, J. Łagosz, D. Rutkowska-Zbik, G. Stochel, M. Brindell „Polipirydylowe kompleksy rutenu zawierające 4,7-difenylo-1,10-fenantrolinę jako potencjalne fotouczulacze w terapii fotodynamicznej”, 65. Zjazd PTChem, Toruń, Polska, 18-21.09.2023
- 37 R. Meenambal, T. Kruk, K. Jakubowska, J. Gurgul, K. Szczepanowicz, M. Szczech, P. Warszyński, D. Jantas, "Effects of Eu^{3+} doping on physio-chemical properties and neuroprotective potential of PAACeO", 1st Aristotle Conference on Chemistry, Thessaloniki, Greece, 12-15.11.2023
- 38 R. Meenambal, T. Kruk, J. Gurgul, P. Warszyński, D. Jantas, “Polyacrylic acid (PAA) conjugated cerium oxide nanoparticles as efficient neuroprotectants against oxidative stress-induced cell damage in human neuronal-like cells”, 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, Kraków, Poland, 29.05-01.06.2023
- 39 A. Micek-Ilnicka, M. Synowiec, M. Radecka "Catalytic and photo-catalytic properties of heteropolyacid-TiO₂ materials", LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 22-24.03.2023

- 40 R. Miller, S.B. Aidarova, E.V. Aksenenko, G. Gochev, A. Javadi, T. Kairaliyeva, M. Karbaschi, N.M. Kovalchuk, V.I. Kovalchuk, M.E. Leser, L. Liggieri, G. Loglio, M. Lotfi, A.V. Makievski, N.O. Mishchuk, N. Mucic, F. Ravera, A.A. Sharipova "Peculiarities in studies of dynamic interfacial properties with single drops and bubbles – pioneering inputs by the late Valentin Fainerman", 9th Bubble and Drop Conference, Lublin, Poland, 11-16.06.2023
- 41 E. Młyńczak "The PHELIX highlight: Electronic properties of quantum materials investigated by spectroscopic methods at the PHELIX beamline", Solaris Update Meeting, 21.06.2023
- 42 E. Młyńczak, I. Aguilera, Y. Mokrousov, L. Plucinski, S. Blügel and C.M. Schneider "New insights into the intrinsic anomalous Hall effect from Fe(001) angle resolved photoemission", Physics of Magnetism 2023, June 2023 Poznań, Poland
- 43 E. Młyńczak, G. Bihlmayer, M. Szczepanik, T. Sobol, K. Freindl, J. Korecki, N. Spiridis, "Surface state on Fe(001)/Au(001) investigated by high resolution angle-resolved spectroscopy", 36th European Conference on Surface Science, Lodz, Poland, 28.08-01.09.2023
- 44 G. Mordarski, K. Skowron, D. Kharytonau, R. Socha "Niskociśnieniowy Generator Ciepła z Wodoru", Inter Nano Poland, Katowice, 11-12.10.2023
- 45 G. Mordarski, K. Skowron, D. Kharytonau, R. Socha, "NGCH Niskociśnieniowy Bezpłomieniowy Piec Wodorowy", III Kongres 3W- Woda-Wodór-Węgiel, Warszawa, 20.11.2023
- 46 M. Morga, P. Batys, D. Kosior, P. Bonarek, A. Harmat, Z. Adameczyk, J. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi "pH-tunable Properties of Polypeptides Monolayers: Experimental Studies and MD Modeling", 37th European Colloid & Interface Society (ECIS 2023), Italy, Naples, 03-08.09.2023
- 47 M. Morga, A.L. Harmat, P. Bonarek, M. Sammalkorpi, J.L. Lutkenhaus, P. Batys, "Kontrolowanie właściwości filmów polipeptydowych za pomocą pH", Fizykochemia granic faz – metody instrumentalne, Lublin, Polska, 16–20.04.2023
- 48 P. Niemiec, D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, "Oddziaływanie wybranych jonów metali szlachetnych z heteropolikwasem fosforowo-wolframowym i fosforomolibdenowym", 55 Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, 22-24.03.2023
- 49 M. Oćwieja, A. Barbasz, O. Kowalska, P. Gnacek, P. Niemiec, D. Duraczyńska, "Electrokinetic properties and biological activity of novel conjugates of chlorpromazine with gold nanoparticles", Recent Achievements in Nanotechnology, Białystok, 28.05-01.06.2023
- 50 A. Pacuła, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, P. Pietrzyk, D. Duraczyńska "Materiały węglowe otrzymane metodą CVD z acetonitrylu w obecności porowatego podłoża powstałego z podwójnych warstwowych wodorotlenków o różnym składzie chemicznym"; Krakowska Konferencja Węglowa Krak-C, Kraków 25-26.05.2023
- 51 A. Pacuła, A. Micek-Ilnicka, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska, P. Pietrzyk "Katalityczna konwersja n-butanolu w obecności H₃PW₁₂O₄₀ osadzonego na porowatych węglach o różnej morfologii ziaren", Zjazd PTChem, Toruń, 18-22.09.2023
- 52 A. Pacuła, A. Micek-Ilnicka, P. Pietrzyk, M. Ruggiero-Mikołajczyk, R.P. Socha, J. Gurgul, B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska "N-doped carbon materials – synthesis, characterization and evaluation as supports for heteropolyacid", LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków 22-24.03.2023

- 53 A. Pajor-Świerzy, D. Duraczyńska, A. Kamyshny, K. Szczepanowicz "Conductive coatings based on nickel@silver core@shell nanoparticles sintered at low temperatures", 14th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Kraków, Polska, 26-29.09.2023
- 54 A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski, P. Sobik, A. Kamyshny, K. Szczepanowicz "The effect of the sintering method on the conductivity of coatings based on nickel@silver core@shell nanoparticles", 20th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN23), Saloniki, Greece, 4-7.07.2023
- 55 A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski, P. Sobik, A. Kamyshny, K. Szczepanowicz "The printed conductive coatings based on nickel@silver core@shell NPs for the fabrication of modern electronics", 37th European Colloid and Interface Society Conference, Neapol, Italy, 3-8.09.2023
- 56 A. Pajor-Świerzy, R. Pawłowski, A. Sypień, K. Szczepanowicz "UV-Vis sintering method for ink based on Ni@Ag core@shell nanoparticles on the flexible substrate", NanoTech Poland 2023, Poznań, Polska, 14-16.06.2023
- 57 H. Pálková, M. Zimowska, L. Jankovič, H. Bujdaková "Immobilization of metal nanoparticles on organo-modified layered silicates", Design of Advanced Inorganic Materials - Workshop on the occasion of 70th anniversary of the institute of inorganic Chemistry SAS, Smolenice, Slovakia, 3- 4.05.2023
- 58 T. Pańczyk, K. Nieszporek, "Wytwarzanie powierzchni zdegradowanego polietylenu. Badanie przy użyciu dynamiki molekularnej", X Konferencja naukowa – Innowacje w Praktyce, Arena Lublin, 15-16.06.2023
- 59 T. Pańczyk, P. Wolski, "A Smart Carrier of Carmustine Anticancer Drug. Properties And Mechanism of Action Predicted by Molecular Simulations dynamics", International Conference on Smart Materials & Structures, Rome, Italy, 13-14.04.2023
- 60 T. Pańczyk, P. Wolski, K. Nieszporek "Niekonwencjonalne formy DNA w klasycznych polach siłowych", Book of abstracts, FGF – Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, Lublin, Poland, 16-20.04.2023
- 61 N. Piergies, D. Święch, M. Oćwieja, C. Paluszkiwicz, M.W. Kwiatek "Nanospectroscopy imaging of the molecule/metal interaction", 12th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, Kraków, 2023
- 62 W. Płaziński "Multiscale computational approaches to investigate the dynamic solution structure of saccharides", 26th IUPAC International Conference on Chemical Thermodynamics, Osaka, Japonia, 26.07-6.08.2023
- 63 M. Polak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Investigation of the properties of inks based on nickel-silver core-shell nanoparticles for the fabrication of conductive materials", 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Kraków, Polska, 26-29.09.2023
- 64 M. Polak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Wpływ właściwości tuszów na bazie nanocząstek typu „core-shell” nikiel-srebro na procesie wytwarzania przewodzących powłok" XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, Lublin, Polska, 23-26.03.2023
- 65 A. Pomorska, A. Michna, D. Lupa, J. Odrobińska-Baliś, Sz. Zapotoczny, Z. Adamczyk „Formation of Modified Chitosan/Carrageenan Multilayers at Silica”, 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023), Naples, Italy, 3-8.09.2023

- 66 J. Prajsnar, R. Bugno, K. Stępień, A. Bojarski, J. Staroń, M. Guzik., „Novel Pathways for Penicillin Synthesis: Chemical and Enzymatic Modifications of 6-Aminopenicillanic Acid using Bacterial-Derived 3-Hydroxy Acids”, World Biotechnology Industry Conference (WBIC), Sapporo, Japonia, 15-17.11.2023
- 67 M. Rak, T. Kruk, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, „Polielektrolitowe nanonośniki substancji neuroprotektoryjnych”, XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, Lublin, Polska, 23-26.03.2023
- 68 K. Rakowski, P. Mulheran, K. Kubiak-Ossowska, B. Jachimska "Badanie wpływu fosforylacji na mechanizm adsorpcji białka Tau na powierzchni modelowych błon komórek nerwowych", Nano(&)BioMateriały – od teorii do aplikacji Toruń, Polska 2023
- 69 K. Rakowski, P. Mulheran, K. Kubiak-Ossowska, B. Jachimska "Effect of Tau protein phosphorylation on the process of its adsorption on the neuronal membrane", 5th International Wrocław Scientific Meeting, Wrocław, Polska 19-21.10.2023
- 70 P. Rastogi, G.S. McCabe, J. Zawala, G. G. Fuller, “Partial coalescence phenomenon under dynamic conditions in rising/falling droplets against bulk oil/water interfaces”, X International Congress on Rheology, Athens, Greece, 29.07-04.08.2023
- 71 T. Rijavec, M. Šubic, D. Pawcenis, M. Saad, K. Gorecki, M. Bucki, S. Bujok, S. Antropov, Ł. Bratasz, K. Kruczała, I. Kralj Cigić, M. Strlič "PVC: Modelling of Decay Processes for Improved Preventive Conservation", BACK, NOW, AND THEN 2023 Understanding Dieter Roth's POeMETRIE series & the Age of Plastics Bridging Science and Art, Academy of Fine Arts, Vienna 2023
- 72 S. Ruiz-Gomez, P. Morales-Fernández, C. Fernandez-Gonzalez, C. Abert, L. Danesi, M. Foerster, M. Ángel Nino, A. Mandziak, D. Wilgocka-Ślęzak, Ewa Madej, M. König, S. Seifert, A. H. Rodríguez, A. Fernandez-Pacheco, C. Donnelly "Tailoring the energy landscape of domain walls with curvature", Joint European Magnetic Symposia (JEMS2023), Madrid, Spain, 27.08-01.09.2023
- 73 M. Saad, K. Kruczała, M. Bucki, K. Górecki, S. Bujok, Ł. Bratasz "Investigating Degradation of Poly(vinyl chloride) by Spectroscopic Methods", International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS12), Faculty of Chemistry Jagiellonian University, Kraków 2023
- 74 M. Seta, A. Gondek, A. Cudnoch-Jędrzejewska, P. Włodarski, S. Skibiński, E. Cichoń, A. Zima, M. Guzik "Different types of ceramic-polymer scaffolds as potential implants for bone regeneration", 8th International Seminar including Special Session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications', Kraków, 17-19.05.2023
- 75 M. Seta, K. Haraźna, K. Kasarełło, D. Solarz-Keller, A. Cudnoch-Jędrzejewska, T. Witko, Z. Rajfur, M. Guzik., „Exploring Novel Biomaterials: Harnessing the Potential of Poly(3-hydroxyoctanoate) for Advanced Wound Dressings”, World Biotechnology Industry Conference (WBIC), Sapporo, Japonia, 15-17.11.2023
- 76 S. Simon, L. Bratasz, "How little is enough - Key Performance Indicators for Energy Consumption and Climate in Memory Institutions", 16. Konservierungswissenschaftliches Kolloquium in Berlin/Brandenburg, 17.11.2023
- 77 S. Skibiński, J. Czechowska, E. Cichoń, P. Pańtak, M. Guzik, P. Szymczak, A. Zima "Novel polyhydroxyalkanoate blends as coatings of beta tricalcium phosphate scaffolds", ICACC2023: 47th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites, Daytona Beach, Florida, USA, 22-27.01.2023

- 78 S. Skibiński, J. P. Czechowska, E. Cichoń, P. Pańtak, A. Ślósarczyk, M. Guzik, A. Zima "Composite scaffolds based on beta tricalcium phosphate and bacteria-derived polyhydroxyalkanoates", 8th International Seminar including Special Session 'Polyhydroxyalkanoates: synthesis, modification and applications', Kraków, 17-19.05.2023
- 79 M. Soboń, L. Bratasz "Development of evidence-based environmental specifications for short religious, cultural and commercial events in historic buildings", FRH Conference 2023 – European Sustainable Religious Heritage, Lund, Szwecja, 20-21.04.2023
- 80 K. Sofińska, S. Seweryn, K. Skirlińska-Nosek, J. Barbasz, P. Batys, A. Cernescu, D. Ghosh, R. Riek, N. Wilkosz, M. Szymoński, E. Lipiec "Nanospectroscopy for Revealing Secrets of Protein Aggregation in Alzheimer's Disease", XII Workshop on Applications of Scanning Probe Microscopy STM/AFM 2023, Zakopane, Poland, 29.11-03.12.2023
- 81 K. Sofińska, S. Seweryn, K. Skirlińska-Nosek, P. Batys, J. Barbasz, E. Lipiec, "The chemical structure and conformation of tau protein aggregates at the growth phase", International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS12) 2023, Kraków, Poland 27.08-1.09.2023
- 82 N. Spiridis, J. Wojas, N. Kwiatek, E. Madej, K. Freindl, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, "Gold nanoparticles on periodic self-organized iron oxide templates", 36th European Conference on Surface Science, Lodz, Poland, 28.08–01.09.2023
- 83 M. Szczęch, A. Hinz, M. Bzowska, and K. Szczepanowicz "Nanoemulsion Templating for Preparing Drug Nanocarriers" 9th Bubble and Drop Conference, Lublin, Polska, 11-16.06.2023
- 84 M. Szczęch, T. Kruk, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz, "Sequential adsorption of charged nanoobjects as a method of functionalization of drug delivery systems", 65. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, Toruń, Polska, 18-22.09.2023
- 85 M. Szczęch, T. Kruk, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz, "Sequential adsorption of charged nanoobjects as a method of formation of multifunctional theranostic systems", 11th International Congress Nanotechnology in Medicine & Biology BIONANOMED 2023, Graz, Austria, 12-14.04.2023
- 86 M. Szczęch, M. Procner, M. Leśkiewicz, M. Regulska, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński and K. Szczepanowicz "Polymeric-based theranostic nanocarriers to central nervous system therapies" 11th International Congress Nanotechnology in Medicine & Biology BIONANOMED 2023, Graz, Austria, 12-14.04.2023
- 87 M. Szczęch, M. Procner, M. Leśkiewicz, M. Regulska, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński, and K. Szczepanowicz „Multifunctional Polymeric Nanocarriers of ‘Difficult-to-Deliver’ Active Substances for the Central Nervous System Disorders”, The 3rd International Conference on Bioengineering and Polymer Science (BPC3), Bucharest, Romania, June 2023
- 88 M. Szczęch, M. Procner, N. Łopuszyńska, M. Leśkiewicz, M. Regulska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, W. Lasoń, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Theranostic polymeric nanocarriers for drug delivery in central nervous system disorders", 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, Toruń, 18-22.09.2023
- 89 J. Szechyńska, A. Kamińska, P. Komorek, B. Jachimska, "The analysis of the influence of selected factors on changes in α -synuclein structure" Advances in Clinical and Experimental Medicine, 5th International Wrocław Scientific Meeting, Wrocław, Poland, 19-21.10.2023,

- 90 M. Szota, B. Jachimska „Dendrymer G4.0 PAMAM jako efektywny nanonośnik leków przeciwnowotworowych”, V Interdyscyplinarna Konferencja Nano (&) BioMateriały - od teorii do aplikacji, Toruń, 2023
- 91 M. Szota, B. Jachimska " G4.0 PAMAM dendrimer as an effective nanocarrier for anticancer drugs" ACS Fall 2023, American Chemical Society National Meeting section Division of Colloid and Surface Chemistry (Nanomaterials), San Francisco, 2023
- 92 R. Szostecki, T. Kruk, K. Szczepanowicz, „Synteza i charakterystyka nanocząstek miedzi", XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, Lublin, Polska, 23-26.03.2023
- 93 R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, "Właściwości Pt/Pd wbudowanych w strukturę heteropolikwasów o strukturze Keggina – obliczenia DFT", 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, Toruń, 18-22.09.2023
- 94 R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, P. Niemiec, "Kompleksy Keggin-metal przejściowy jako jednoatomowe katalizatory w reakcjach fotokatalitycznych - Obliczenia DFT", 65. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, PTChem 2023, Toruń, 18-22.09.2023
- 95 R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, D. Rutkowska-Zbik, “DFT Studies of Vanadium-based systems for electro- and photochemistry”, COST CA 18234 Conference "Designing the Future: Electro-, Photo- and Thermo-Chemical Water splitting", Bruksela, Belgia, 20-22.02.2023
- 96 M. Wasilewska, A. Michna, A. Pomorska, K. Wolski, Sz. Zapotoczny, T. Gerecsei, E. Farkas, I. Szekacs, R. Horvath „Tracking of cell adhesion on macroion layers”, 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023), Naples , Italy, 3-8.09. 2023
- 97 A. Wiertel-Pochopień, M. Borkowski, P. Batys, P.B. Kowalczyk, J. Zawała, "Właściwości pienne mieszanek roztworów kationowych i niejonowych surfaktantów o różnej aktywności powierzchniowej", „Fizykochemia granic faz – metody instrumentalne”, Lublin, Polska, 16–20.04.2023
- 98 A. Wiertel-Pochopień, J. Zawała "Dynamiczna warstwa adsorpcyjna, a stabilność filmów zwilżających", Fizykochemia granic faz – metody instrumentalne, Lublin, 16-20.04.2023
- 99 A. Winiarska, D. Hege, J. M. Schuller, J. Heider, M. Szaleniec “H₂-dependent recycling of NADH and reduction of carboxylic acid by tungsten aldehyde oxidoreductase”, 1st European Society of Applied Biocatalysis E-Congress, 27-29.11.2023
- 100 M. Zaleski, A. Pajor-Świerzy, P. Warszyński "Copper@Silver nanowires for conductive inks and pastes" NanoPaint's Training School on Rheology of Complex Systems, Madryt, Hiszpania, 27-31.03.2023
- 101 M. Zaleski, A. Pajor-Świerzy, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Core@shell Nanowires for Conductive Inks and Pastes", 9th Bubble and Drop Conference, Lublin, Polska, 11-16.06.2023
- 102 M. Zimowska, M. Śliwa, H. Pálková, R. P. Socha, P. Niemiec, E. Scholtzova “ Functionalized hybrid materials based on clay minerals for CO₂ sorption”, EUROCLAY 2023 International Conference of European Clay Groups Association, Bari, Italy, 24-27.07.2023
- 103 S. Zimowski, M. Zimowska, J. Krupa, “Badania odporności na zużycie twardych powłok zwiększających trwałość ostrzy narzędzi skrawających”, [Wear resistance of hard coatings increasing durability of cutting tool blades], XLI Ogólnopolska Konferencja, Jesienna Szkoła Tribologiczna 2023, Łańcut, 05-08.09.2023

POSTERY

- 1 I. Aleksić, G. Oleksy, K. Krämer, D. Hege, Y. Gemmecker, J. Heider, M. Szaleniec "Standardizing the methodology for transformation of anaerobic bacteria as hosts for recombinant enzyme production and development of fast activity screening for tungsten-dependent aldehyde oxidoreductases", 16th International Symposium on Biocatalysis & Biotransformations Biotrans 2023, La Rochelle 25-29.06.2023
- 2 I. Aleksic, M. Tataruch, M. Polakovic, V. Illeova, A. Miłaczewska, P. Cabadaj, A. Kluza, M. Szaleniec, T. Borowski "1-(4-hydroxyphenyl)-ethanol dehydrogenases from *A. aromaticum* - mechanism of inactivation" BIOTRANS - International Symposium on Biocatalysis & Biotransformations, La Rochelle 25-29.06.2023
- 3 S. Antropov, M. Bury, K. Poznańska, Ł. Bratasz. "Trójwymiarowy model obrazu na desce z rozwinięta siatka spękań", Future of the Past - Innovative Research and Preservation of Cultural Heritage, Toruń, 14-15.06.2023
- 4 J. Barbasz, K. Sofińska, P. Bicz, "Innovative Metalworking System Based on Advanced Big Data Analysis" XII Workshop on Applications of Scanning Probe Microscopy STM/AFM 2023, Zakopane, Poland, 29.11-3.12.2023
- 5 P. Batys, M. Morga, P. Bonarek, T. Kastinen, D. Lupa, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi, "Understanding the pH dependence of poly l-lysine and poly lglutamic acid complex formation", 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023), Naples, Italy, 3-8.09.2023
- 6 S. Baumgart, D. Kupczyk, A. Archęła, O. Koszła, P. Sołek, W. Płaziński, A. Płazińska, T. Kosmowski, R. Studzińska "Novel N-cyclopentyl derivatives of pseudothiohydantoin with potential anticancer and 11 β -HSD inhibitory activities.", XXIV International Symposium "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds". Łódź, November 24, 2023.
- 7 B. Blyzniuk, A. Dziwoki, K. Freindl, A. Koziół-Rachwał, E. Madej, E. Młyńczak, M. Szpytma, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, and N. Spiridis, "Magnetization reversal in Fe(001) films grown on MgO(001) by magnetic field assisted molecular beam epitaxy", The European Conference Physics of Magnetism 2023 (PM'23), Poznań 2023
- 8 M. Borkowski, D. Lupa, B. Braunschweig, G. Gochev, O. Demchuk, P. Kuśtrowski, P.B. Kowalczyk, J. Zawala "Synergistic foaming systems based on surface-modified magnetic nanoparticles and amino acid surfactants in destabilization of real foams in a magnetic field", Flotation 2023, Cape Town, South Africa, 06-09.11.2023
- 9 S. Bujok, K. Kruczała, Ł. Bratasz "Warunki pękania obiektów z poli(chlorku winylu)", Book of Abstracts. Future of the Past 2023, Toruń 14-15.06.2023
- 10 A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Zbik, „O₂ binding by (M-porphine)₂ dimers (M = Fe, Ni, Mn, Co): DFT Studies”, LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023
- 11 A. Drzewiecka-Matuszek, J. Dedecek, D. Rutkowska-Zbik "DFT studies of O₂ activation by iron and nickel bi-metallic sites", The 6th Quantum Bio-Inorganic Chemistry Conference, Warszawa, Polska, 29.08-1.09.2023
- 12 A. Drzewiecka-Matuszek, A. Kornas, E. Tabor, D. K. Wierzbicki, J. E. Olszowka, R. Pilar, J. Dedecek, M. Sliwa, H. Jirglova, S. Sklenak, D. Rutkowska-Zbik, K. Mlekodaj "Activation of molecular oxygen over binuclear iron centers: in-sights from spectroscopy and DFT modeling", Molecules and Light 2023, Kraków, Polska, 24-27.09.2023

- 13 M. Duda, P. Konieczny, M. Oszejca, W. Lasocha, "Synthesis, crystal structure, and magnetic properties of new coordination compounds of cobalt(II) halides with 2-methylaniline" 64 Konwersatorium Krystalograficzne Wrocław, 6-7.07.2023
- 14 M. Dudek, M. Mosiałek, A. Sultan, M.B. Hanif "Sr-doped BCY–LSCF composite cathodes: preparation, properties and electrochemical tests in ceramic proton-conducting fuel cells", 7th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC7), Brno, Czech Republic 28-31.08.2023
- 15 D. Duraczyńska, A. Michalik, B.D. Napruszewska, A. Walczyk, E.M. Serwicka "Deposition of TiO₂ nanoparticles prepared by inverse microemulsion in exfoliated montmorillonite: SEM/TEM/EDX study", LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023
- 16 A. Dziwoki, B. Blyzniuk, K. Freindl, N. Kwiatek, E. Madej, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, J.Korecki, N. Spiridis, "Sample holders and adapters for Magnetic Field Assisted Epitaxial Growth of Magnetite Films" 36th European Conference on Surface Science, Lodz, Poland 28.08-01.09.2023
- 17 K. Freindl, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, N. Spiridis, "Oxidation Resistance of Fe on Ru(0001) – the Role of the Substrate and Preparation Conditions", 36th European Conference on Surface Science, Lodz, Poland 28.08-01.09.2023
- 18 M. Gackowski, A. Selent, I. Ainasoja, M. Mazur, M. Hunger, J. Datka, V.-V. Telkki "Mechanism of the cleansing effect during the TBAOH-treatment of ultra-stable zeolite Y" LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023
- 19 P. Gnacek, O. Kowalska, N. Piergies, P. Niemiec, D. Duraczyńska, M. Oćwieja "Charakterystyka spektroskopowa nowych koniugatów chloropromazyny z nanocząstkami złota" X Łódzkie sympozjum Doktorantów Chemii, Łódź, Polska, 18-19.05.2023
- 20 P. Gnacek, N. Piergies, O. Kowalska, M. Oćwieja, P. Niemiec "Spectroscopic studies on the adsorption of neuroleptics belonging to phenothiazine derivatives on gold nanoparticle surfaces" 12th International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy, Kraków, 2023
- 21 G. Gochev, D. Gawel, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, E. V. Aksenenko, V.I. Kovalchuk, E. Schneck, R. Miller, J. Zawala "Current view on adsorption dynamics and dilational rheology of bovine serum albumin at water/air interface", 9th Bubble and Drop Conference, Lublin, Poland, 11-16.06.2023
- 22 B. Gołyszny, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, G. Antczak, "Structural and electronic properties of F16CuPc thin films on Ag (100) surfaces", XII Workshop on Applications of Scanning Probe Microscopy – STM/AFM 2023, Zakopane, 29.11-03.12.2023
- 23 B. Gołyszny, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, G. Antczak, "Physical vapor deposition of ultrathin F16CuPc films on Ag(100) surfaces", 36th European Conference on Surface Science, Lodz, Poland 28.08-01.09.2023
- 24 M. Guzik, K. Haraźna, K. Kasarełło, D. Solarz-Keller, A. Cudnoch-Jędrzejewska, T. Witko, Z. Rajfur, M. Seta "A novel poly(3-hydroxyoctanoate) diclofenac decorated dressings for wound healing", Polymers/Composites/3Bs Materials 2023 Joint Intl. Conference, Bangkok, Tajlandia, 13-28.02.2023
- 25 M. Guzik, J. Prajsnar, E. Cichoń, R. Karcz, J. Kryściak-Czerwenka, „Advancing Sustainable Bioplastics through Microbial Upcycling for Novel Biopolymer Production”, 10th Conference of Mikrobiokosmos, Larisa, Grecja, 17-19.9.2023

- 26 K. Harażna, A. T. Fricker, C. S. Taylor, R. Konefał, A. Medaj, S. Bujok, M. Zimowska, B. Leszczyński, A. Wróbel, A. J. Bojarski, I. Roy, M. Guzik, "Bacterial polyester – poly(3-hydroxyoctanoate) (P(3HO)) as a versatile material for medical applications", Tissue Engineering and Regenerative Medicine International Society – Asia Pacific (TERMIS-AP), Hongkong 16-19.10.2023
- 27 B. Jachimska, P. Komorek, K. Rakowski, M. Szota "Conformational Stability of Bovine Serum Albumin as a Result of Interactions with Gold Surface" American Chemical Society National Meeting, San Francisco, 2023
- 28 B. Jachimska, M. Szota, U. Szwedowicz, N. Rembiałkowska, A. Janicka-Kłós, J. Kulbacka „Theranostic nanocarriers of doxorubicin based on dendrimer” Book of abstract, Advances in Clinical and Experimental Medicine, 5th International Wrocław Scientific Meeting, Wrocław, Poland, 2023
- 29 B. Jachimska, M. Szota, O. Michel, J. Kulbacka „ Physicochemical properties and biological activity of dendrimer complex with fluorouracil” Book of abstract, Advances in Clinical and Experimental Medicine, 5th International Wrocław Scientific Meeting, Wrocław, Poland, 2023
- 30 A. Janas, C. Andersen, D. Favier, L. Fuster-López, L. Bratasz, M. Mecklenburg, M. Scharff, P. Kékicheff, R. Kozłowski "Time evolution of mechanical properties and shrinkage of drying oil paints" ICOM-CC 20th Triennial Conference, Preprints, Valencia, 18–22.09.2023
- 31 V. Kaipanchery, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Zbik, "Methane Oxidative Coupling on Au-TiO₂ Catalyst: DFT Studies", EuropaCat2023, 15th European Congress on Catalysis, Prague, Czech Republic 27.08-1.09.2023
- 32 V. Kaipanchery, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Zbik, „DFT and TD-DFT Studies on the Mechanism of Methane Oxidative Coupling on Au-TiO₂ Catalyst”, NAM28, Providence, USA, 18-23.06.2023
- 33 K. Kamińska, M. Procner, M. Regulska, M. Leśkiewicz, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, W. Lasoń, A. Basta-Kaim. "Polymeric -based nanocarriers for delivery of neuroprotective drugs though blood-brain barrier", 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, Kraków, Poland, 29.05-01.06.2023
- 34 A. Kežionis, T. Šalkus, M. Dudek, D. Madej, M. Mosiałek, B. Napruszewska, W. Łasocha, M.B. Hanif, M. Motola “Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} kietojo elektrolito impedanso spektrų modeliavimas ekvivalentine grandine ir analizė DRT matodu / Impedance spectra of Al_{0.04}Sc_{0.06}Zr_{0.9}O_{1.95} solid electrolyte analysed by DRT method and equivalent circuit modelling”, 45-oji Lietuvos nacionalinė fizikos konferencija, LNFK’45, Wilno, Litwa, 25-27.10.2023
- 35 K. Kieca, M. Oszejca, D. Rutkowska-Zbik, G. Stochel, "Badania S-nitrozacji z udziałem rozpuszczalnej w wodzie porfiryny żelazowej”, 65. Zjazd PTChem, Toruń, Polska, 18-21.09.2023
- 36 R. Knura, K. Skibińska, S. Sahayaraj, G. Putynkowski, R.P. Socha “Wpływ warunków depozycji metodą ALD na jednorodność warstw tlenków metali”, 65. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Toruń, 18-22.09.2023
- 37 D. Kosior, G. Gochev, P. Batys, J. Zawała "Effect of n-hexane vapors on the behavior of air bubbles in solutions of non-ionic and ionic surfactants", 9th Bubble and Drop Conference, Lublin, Poland, 11-16.06.2023
- 38 R. Kosydar, D. Duraczyńska, M. Sadowska, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Oćwieja “Platinum nanoparticles with various surface charge deposited on silica for hydrogenation of acetophenone”, LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023

- 39 R. Kosydar, E. Lalik, K. Samson, D. Duraczyńska, J. Gurgul, T. Szumelda, A. Drelinkiewicz "Composition-dependent activity of bimetallic PdIr_x/carbon catalysts in furfural conversion via competitive hydrogenation and acetalization", 15th European Congress on Catalysis, EuropaCat 2023, Prague, Czechia, 27.08-01.09.2023
- 40 O. Kowalska, M. Kula-Maximenko, A. Gorczyca, E. Pocięcha, A. Lada, J. Maciejewska-Prończuk, M. Oćwieja, "Wpływ zaprojektowanych nanocząstek złota na mikroalgi *Chlorella Vulgaris*", X Łódzkie sympozjum Doktorantów Chemii, Łódź, Polska, 18-19.05.2023
- 41 K. Kozak, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz "Udoskonalenie przewodnictwa powłok poprzez optymalizację procesu syntezy nanocząstek nikiel-srebro o strukturze „core-shell”" III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa "Blżej Chemii", Kraków, Polska, 07-08.01.2023
- 42 T. Kruk, M. Szczęch, W. Tomal, M. Rak, K. Łęgowski, M. Bzowska, A. Hinz, S. Łukasiewicz, M. Szuwarzyński, K. Szczepanowicz "Characterization and functionalization of polyelectrolyte coatings as a new platform for biomedical application – control of specific/nonspecific protein adsorption", 13th International Symposium on Polyelectrolytes, Prague, Czechia, 28.08-01.09.2023
- 43 T. Kruk, M. Szczęch, W. Tomal, M. Rak, K. Łęgowski, M. Bzowska, A. Hinz, S. Łukasiewicz, M. Szuwarzyński, K. Szczepanowicz, "Control of specific/non-specific protein adsorption – functionalization of polyelectrolyte coatings for biomedical application", 37th European Colloid and Interface Society Conference, Naples, Italy, 03-08.09.2023
- 44 L. Krzemień, J. Barbasz, "The role of tissue in micro indentation tests of a plant cell", Book of abstracts, 36th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics, Kraków, Poland, 24-28.09.2023
- 45 Ł. Lasyk, J. Gronwald, W. Olszewski, M. Bidziński, P. Żuk, A. Prusaczyk, E. Prokurat, J. Barbasz, T. Włodarczyk, "EP069/#511 Evaluation the multilayer scanner for LBC cytology with software containing neural networks and machine learning enabling remote support for the diagnosis enhanced with differentiating algorithm", Annual Global Meeting of the International Gynecologic Cancer Society (IGCS 2023), Seoul, South Korea, 5-7.11.2023
- 46 K. J. Legawiec, M. Kruszelnicki, P. Basařová, J. Zawała, M. Zawadzka, I. Polowczyk, „Dynamika adhezji pęcherzyka gazu na powierzchniach o różnej hydrofobowości estryfikowanych n-alkoholami w obecności biosurfaktantu glikolipidowego”, Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, Lublin, Polska, 16-20.04.2023
- 47 A. Lenart-Boroń, P. Boroń, J. Prajsnar, M. Guzik, M. Źelazny, M. Pufelska, M. Chmiel, "COVID-19 lockdown allowed for mountain water quality improvement by affecting human behavior", 6th International Conference on Testing the Waters (TTW6), Oxford, England, 26-27.07.2023
- 48 A. Lenart-Boroń, M. Chmiel, K. Kulik, M. Guzik, J. Prajsnar, M. Źelazny, „Występowanie i antybiotykoodporność bakterii w górskim środowisku wodnym” Innowacyjne Technologie w Rolnictwie, Kraków, Polska, 7.07.2023
- 49 A. Lenart-Boroń, K. Kulik, P. Boroń, J. Prajsnar, K. Hejnar, "Antibiotics and bacteriological pollution gradient with potentially pathogenic genera along a mountain river", 6th International Conference on Testing the Waters (TTW6), Oxford, England, 26-27.07.2023

- 50 M. Leśkiewicz, K. Kamińska, E. Trojan, M. Prochner, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, W. Lasoń, A. Basta-Kaim "Effects of ebselen, edaravone and theranostic nanocarriers on the oxygen glucose deprivation-induced cell damage: a study in organotypic hippocampal culturesBRO" 11th World Congress of Neuroscience, Granada, 9–13.09.2023
- 51 V. Lutsyk, W. Płaziński "Zastosowanie hybrydowego podejścia MD/QM do badania konformacji pierścieni piranozowych kwasów L-iduronowego i L-guluronowego oraz ich pochodnych", X Konferencja Naukowa "Innowacje w Praktyce" Arena Lublin, 15-16.06.2023
- 52 W. Łasocha "Chemiczna przeróbka odnawialnych surowców naturalnych. 'Być albo nie być' współczesnej cywilizacji", III Naukowa Konferencja Tematyczna PKN ORLEN: "Kataliza - terażniejszość i przyszłość", Płock, 19-20.10.2023
- 53 K. Łęgowski M. Rak, T. Kruk, K. Szczepanowicz „Antyadhezyjne właściwości filmów polielektrolitowych", III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Blżej Chemii”, Kraków, Polska, 07-08.01.2023
- 54 N. Łopuszyńska, K. Szczepanowicz, M. Szczęch, K. Jasiński, K. Stachurski, P. Warszyński, W.P. Węglarz "Gadolinium labeled polyelectrolyte nanocapsules for drug delivery and MRI detection – MR investigation of the influence of shell composition on contrasting properties" Red Hot Fluorine 19F MRI & SAMS meet Kraków MRI Workshop, Kraków, 4-6.12.2023
- 55 N. Łopuszyńska, K. Szczepanowicz, M. Szczęch, K. Jasiński, K. Stachurski, P. Warszyński, W.P. Węglarz "Gadolinium labelled polyelectrolyte theranostic nanocapsules for therapeutic cargo delivery and MRI detection. The influence of shell composition on contrasting properties" 18th European Molecular Imaging Meeting (EMIM 2023), Salzburg, 14-17.03.2023
- 56 J. Maciejewska-Prończuk, P. Żeliszewska, K. Matras-Postolek, M. Wasilewska, M. Gajewska, P. Gnacek, D. Ungor, E. Csapó, M. Oćwieja "Kinetics of fluorescent gold nanocluster deposition at solid/liquid interfaces", 24th Polish Concerence of Chemical and Process Engineering, Szczecin, 2023
- 57 J. Maciejewska-Prończuk, P. Żeliszewska, M. Oćwieja "Fluorescencyjne materiały warstwowe na bazie nanoklastrów złota" XV Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2023 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, Lublin, 23-26.03.2023
- 58 E. Masoumifeshani, D. Rutkowska-Zbik, T. Korona “How to analyse excited state densities? Dependence of molecular descriptors on the choice of theoretical method and basis set”, Molecules and Light 2023, Kraków, Polska, 24-27.09.2023
- 59 M. Matczak, B. Anastaziak, M. Urbaniak, D. Kiphart, F. Stobiecki, A. Mandziak, E. Madej, D. Wilgocka-Słęczak, P. Kuświk "Spin chirality in Co/Ni layered system before and after plasma oxidation" Magnetism, Interactions and Complexity: innovative ideas on spin wave dynamics and transport properties in low-dimensional materials - satellite workshop to The European Conference Physics of Magnetism 2023, Będlewo 24-28.07.2023
- 60 A. Micek-Ilnicka, M. Synowiec, M. Radecka, P. Niemiec, R.Tokarz-Sobieraj "Photo-thermo-catalytic properties of heteropolyacid-TiO₂ systems", 15th European Congeress on Catalysis, EuropaCat2023, Prague, Czech Republic, 27.08-01.09.2023
- 61 A. Michna, P. Batys, D. Lupa, A. Pomorska, M. Wasilewska, Z. Adamczyk “Adsorption kinetics of fibroblast growth factor 21 on various interfaces: modelling and experimental studies”, 37th Conference of the European Colloid and Interface Society (ECIS 2023), Naples , Italy, 3-8.09.2023

- 62 J. Mokrzycki, M. Fedyna, D. Duraczyńska, M. Marzec, R. Panek, W. Franus, T. Bajda, R. Karcz "Bimetaliczne układy Cu/Mn osadzone na mezoporowatych krzemianach typu MCM-41 wytworzonych z popiołów lotnych jako katalizatory spalania toluenu", Jubileuszowa konferencja z okazji 55-lecia Zakładu Fizyki Chemicznej Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, Fizykochemia układów złożonych, Kraków, 22–23.06.2023
- 63 G. Oleksy, A. Sekuła, K. Krämer, I. Aleksic, M. Szaleniec, J. Heider, A. Pierik, "Unraveling the benzylsuccinate synthase catalytic properties: modeling vs the experimental approach" 16th International Symposium on Biocatalysis & Biotransformations Biotrans 2023, La Rochelle 25-29.06.2023
- 64 A. Pacuła, J. Gurgul, M. Ruggiero-Mikołajczyk, P. Pietrzyk, D. Duraczyńska "The composites of N-doped carbon materials and iron species – synthesis, characterization and evaluation in oxygen reduction reaction", 15th European Congress on Catalysis EuropaCat2023, Prague, The Czech Republic, 27.08–1.09.2023
- 65 A. Pacuła, J. Gurgul, R. P. Socha, M. Ruggiero-Mikołajczyk, B. D. Napruszewska, P. Pietrzyk, D. Duraczyńska, G. Mordarski "Electrocatalytic performance of the composites containing N-doped carbon nanotubes and iron nanoparticles in oxygen reduction reaction", 15th European Congress on Catalysis EuropaCat2023, Prague, The Czech Republic, 27.08–1.09.2023
- 66 A. Pacuła, M. Oćwieja, M. Sadowska, P. Nowak, "Photocatalytic performance of metal-TiO₂ composites obtained via deposition of noble metal nanoparticles on commercial TiO₂" LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023
- 67 T. Panczyk, P. Wolski, K. Nieszporek, "Release of selected anticancer drugs from the internal space of carbon nanotubes functionalized by DNA fragments analyzed by means of molecular dynamics", The 23th International Conference on the Science & Applications of Nanotubes and Low-Dimensional Materials, Arcachon near Bordeaux, France 4-9.06.2023
- 68 W. Plazinski, V. Lutsyk "Multiscale computational approaches to study the solution structure of saccharides", The 21th European Carbohydrate Symposium, Eurocarb 21, Paris, France, 9-13.07.2023
- 69 Š. Pok, T. Rijavec, D. Pawcenis, M. Saad, M. Bucki, S. Bujok, S. Antropov, Ł. Bratasz, K. Kruczała, I. Kralj Cigić, M. Strlič "PVCare: Preventive Conservation Strategies for Poly(vinyl chloride) Objects", 1st Conference of the Slovenian Node of the European Research Infrastructure for Heritage Science, E-RIHS Slovenia, Ljubljana 2023
- 70 M. Polak, A. Pajor-Świerzy, M. Naworyta, K. Szczepanowicz "Badanie właściwości tuszów na bazie nanocząstek metali do procesu wytwarzania przewodzących materiałów" III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa "Bliżej Chemii", Kraków, Polska, 07-08.01.2023
- 71 K. Poznańska, A. Hola, A. Janas, M. Strojceki, R. Kozłowski, M. Mecklenburg, L. Fuster-López, P. Kékicheff, D. Favier, C. Krarup Andersen, M. Scharff, Ł. Bratasz "Mechanical properties of oil and tempera paints", Wood Science and Technology III: methods to examine panel paintings and their preventive and remedial conservation, Maastricht, The Netherlands, 19-21.10.2023
- 72 K. Poznańska, A. Hola, A. Janas, M. Strojceki, R. Kozłowski, M. Mecklenburg, L. Fuster-López, P. Kékicheff, D. Favier, C. Krarup Andersen, M. Scharff, Ł. Bratasz "Właściwości mechaniczne farb olejnych i temperowych", Future of the Past - Conference on Innovative Research and Preservation of Cultural Heritage, Toruń, 14-15.06.2023

- 73 J. Prajsnar, R. Bugno, A. Bojarski, K. Stępień, M. Guzik, "Polyhydroxyalkanoates – biodegradable and biocompatible polymers produced by environmental bacteria", Polymers/Composites/3Bs Materials 2023 Joint Intl. Conference, Bangkok, Tajlandia, 13-28.02.2023
- 74 J. Prajsnar, M. Tataruch, R. Budno, B. Jachimska, M. Guzik, A.J. Bojarski, "Polyhydroxyalkanoates (PHA) as a source of chiral synthons for the production of new drugs", 8th International Seminar On Modern Polymeric Materials for Environmental applications, Kraków, Polska, 17-19.05.2023
- 75 M. Rak, K. Łęgowski, T. Kruk, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, „Polielektrolitowe nanonośniki substancji neuroprotektynowych”, III Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Blżej Chemii”, Kraków, Polska, 07-08.01.2023
- 76 K. Rakowski, P. Mulheran, K. Kubiak-Ossowska, B. Jachimska "Effect of Tau protein phosphorylation on the process of its adsorption on the neuronal membrane", ACS FALL 2023 - Harnessing the Power of Data, San Francisco, USA 2023
- 77 M. Regulska, M. Procter, M. Leśkiewicz, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, A. Basta-Kaim, W. Lasoń, P. Warszyński, "In vitro analysis of cytotoxicity and neuroprotective potency of theranostic nanocarriers for drug delivery in CNS disorders", 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, Kraków, Poland, 29.05-01.06.2023
- 78 D. Rutkowska-Zbik, R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, „DFT studies on Cu_n/TiO₂ (n=1-6) system for water splitting”, COST 18234 Meeting “Development of nanocrystal materials through computational modeling” Haifa, Izrael, 17-19.07.2023
- 79 A. Senderowski, D. Rutkowska-Zbik, A. Mendez, I. Lampre, H. Remita „TD-DFT studies on photochemical properties of the platinumium carbonyl Chini clusters”, LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023
- 80 M. Soboń, Ł. Bratasz “What makes a wooden object vulnerable to dynamic environmental variations?”, Wood Science and Technology III: methods to examine panel paintings and their preventive and remedial conservation, Maastricht, Holandia, 19-21.10.2023
- 81 S. Sowa, A. Brzyska, Ł. Ponikiewski, M. Zubik-Duda, A. Lipke, A. Gładysz-Płaska "The fluorescent properties of 3-arylbenzo[b]phosphole oxides", XXIV International Symposium "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds" Łódź 2023
- 82 K. Stachurski, N. Łopuszyńska, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, K. Jasiński, T. Didriksen, Y. Yang, A. Lind, P. Warszyński, W.P. Węglarz, "Investigation of MRI Contrasting Properties of Potential Theranostic Nanocarriers", 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, Kraków, Poland, 29.05-01.06.2023
- 83 M. Szaleniec, G. Oleksy, K. Krämer, I. Aleksić, J. Heider, “Benzylsuccinate synthase catalyzing C-C bond formation -mechanistic study”, 1st European Society of Applied Biocatalysis E-Congress, 27-29.11.2023
- 84 M. Szczęch, H. Genç, I. Cicha, K. Szczepanowicz "Nanocarriers for cardiovascular drug delivery: Development and initial evaluation of biocompatibility", Congres Documentation, 11th International Congress Nanotechnology in Medicine & Biology BIONANOMED 2023, Graz Austria, 12-14.04.2023
- 85 M. Szczęch, H. Genç, I. Cicha, K. Szczepanowicz, "Polymeric nanocarriers for cardiovascular drug delivery: Development and initial evaluation of biocompatibility", 5th Central European Biomedical Congress, Future trends in health interventions, Kraków, Poland, 29.05-01.06.2023

- 86 M. Szczęch, H. Genç, I. Cicha, K. Szczepanowicz "Polymer-based nanocarriers for cardiovascular drug delivery: development and initial evaluation of biocompatibility", 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Krakow, Poland, 26-29.09.2023
- 87 M. Szczęch, T. Kruk, A. Hinz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, W. Węglarz, M. Bzowska, K. Szczepanowicz, "Layer-by-layer as a method of functionalization of drug delivery systems", 13th International Symposium on Polyelectrolytes, Prague, Czechia, 28.08-01.09.2023
- 88 M. Szczęch, M. Prochner, N. Łopuszyńska, M. Leśkiewicz, M. Regulska, K. Jasiński, W.P. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński and K. Szczepanowicz "Functional polymeric nanocarriers to the central nervous system", 37th European Colloid and Interface Society Conference, Neapol, Italy, 3–8.09.2023
- 89 M. Szczęch, M. Prochner, N. Łopuszyńska, M. Regulska, M. Leśkiewicz, K. Jasiński, K. Stachurski, B. Pomierny, W.P. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński and K. Szczepanowicz "Polymer-based theranostic nanocarriers for the central nervous system disorders", 4th International Workshop on Functional Nanostructured Materials (FuNaM-4), Krakow, Poland, 26-29.09.2023
- 90 L. Szyk-Warszyńska, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, "Lateral mobility of polymeric core-shell nanocapsules in agarose gels", 37th European Colloid and Interface Society Conference, Neapol, Italy, 3–8.09.2023
- 91 L. Szyk-Warszyńska, M. Szczęch, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "Lateral mobility of AOT-CUM6/PLL/PGA-PEG and PCL-CUM6/PLL/PGA-PEG microcapsules in agarose gel" 37th European Colloid and Interface Society Conference, Neapol, Italy, 3–8.09.2023
- 92 A. Szymaszek-Wawryca, U. Díaz, D. Duraczyńska, B. Samojeden, M. Motak "One-pot synthesized Fe-ITQ-2 as catalyst for selective catalytic reduction of nitrogen oxides with ammonia – the effect of iron loading", 15th European Congress on Catalysis EuropaCat2023, Prague, The Czech Republic, 27.08–1.09.2023
- 93 A. Szymaszek-Wawryca, P. Summa, U. Díaz, D. Duraczyńska, B. Samojeden, M. Motak "NH₃-SCR catalytic performance of natural clinoptilolite modified with hydrotalcite-like phase", 15th European Congress on Catalysis, EuropaCat2023, Prague, The Czech Republic, 27.08–1.09.2023
- 94 E. Świerkosz, M. Ślęzak, H. Nayyef, A. Klimeczek, M. Szpytma, W. Janus, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zajac, A. Kozioł-Rachwał, and T. Ślęzak „Out of plane antiferromagnetic spins induced by reorientation transition in NiO(111)/Co bilayers”, Abstracts. The European Conference Physics of Magnetism 2023 (PM’23), Poznań 2023
- 95 R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Zbik “DFT studies on Cu_n/TiO₂ (n=1-7) system for water splitting”, 244th ECS Meeting, Geteborg, Szwecja, 8-12.10.2023
- 96 W.P. Węglarz, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, K. Szczepanowicz, P. Warszyński "MRI-friendly polyelectrolyte theranostic nanocarriers" 18th European Molecular Imaging Meeting (EMIM 2023), Salzburg, 14-17.03.2023
- 97 A. Winiarska, F. Ramírez-Amador, G. Pacek, I. Aleksic, D. Hege, Y. Gemmecker, S. Prinz, G. Hochberg, J. Heider, J. Michael Schuller, M. Szaleniec, “Tungsten aldehyde oxidoreductase/hydrogenase forms an enzymatic decorated protein nanowire”, 16th International Symposium on Biocatalysis & Biotransformations Biotrans 2023, La Rochelle 25-29.06.2023

- 98 Z. Wojdyla, T. Borowski “Computational redesign of substrate selectivity of oxidases with solvent-exposed active sites” FEBS Advanced Course on Computational Approaches to Understanding and Engineering Enzyme Catalysis, Zagreb, Croatia, 25-29.09.2023
- 99 M. Zaleski, A. Pajor-Świerzy, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Core@shell Nanowires for Conductive Inks and Pastes", 37th European Colloid and Interface Society Conference, Naples, Italy, 3-8.09.2023
- 100 J. Zawala, J. Miguet, P. Rastogi, O. Atasi, M. Borkowski, B. Scheid, G.G. Fuller, “Wpływ dynamicznej warstwy adsorpcyjnej na stabilność filmów pianowych – badania ilościowe przy użyciu Dynamic Fluid-film Interferometry”, Fizykochemia Granic Faz – metody instrumentalne, Lublin, Polska, 16-20.04.2023
- 101 M. Zimowska, J. Gurgul, M. Mosiałek, K. Łątka “Structure evolution of perovskite-type $\text{YFe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{O}_3$ triggered by the calcination temperature”, LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023
- 102 M. Zimowska, M. Śliwa, H. Palkova, J. Gurgul, Robert P. Socha “Microwave-activated hybrid composites based on clay minerals for CO_2 capture – SEM/ESD and spectroscopic studies”, LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, Kraków, Polska, 22-24.03.2023

WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

- 1 A. Baliś "Influence of polymers molar mass and size of β -lactoglobulin nanogel particles on stability of aqueous two phase systems", Instytut Charlsa Coulomba w Montpellier, Francja
- 2 J. Barbasz, "Artificial intelligence in medicine – is it likely to work?", Sano science, Kraków
- 3 Ł. Bratasz "Heritage science – a new discipline", Uniwersytet Gedai w Tokio, Japonia
- 4 Ł. Bratasz " HERIE - preventive conservation platform for decision support", Uniwersytet Gedai w Tokio, Japonia
- 5 Ł. Bratasz "When and why do paintings crack and delaminate?", Polytechnical University, Valencia, Hiszpania
- 6 Ł. Bratasz "HERIE - preventive conservation platform for decision support", Kanadyjski Instytut Konserwacji, Ottawa, Kanada
- 7 S. Bujok "HERIE - preventive conservation platform for decision support", Kanadyjski Instytut Konserwacji, Ottawa, Kanada
- 8 Ł. Bratasz "Decision-making digital tools in preventive conservation" (Online workshop: Rijksmuseum, UOL, National Gallery London, Smithsonian Institution, UCL, IKiFP)
- 9 Ł. Bratasz "Zarządzanie klimatem w dziedzictwie", w ramach Akademii Dziedzictwa dla Ukrainy, Międzynarodowe Centrum Kultury w Krakowie
- 10 Ł. Bratasz "Zarządzanie ryzykiem w obszarze dziedzictwa kultury", Zamek Królewski na Wawelu, Kraków
- 11 M. Bury, Ł. Bratasz " Physical model of canvas paintings", Royal Danish Academy of Fine Arts, Copenhagen, Dania
- 12 M. Guzik, „Polihydroksyalkaniiny - polimery z bakterii - synteza i zastosowania”, Wydział Chemii UJ
- 13 V. Kaipanchery, A. Drzewiecka-Matuszek, R. Tokarz-Sobieraj, M. Witko, D. Rutkowska-Zbik “DFT Studies on C-H Bond Activation in Alkanes”, Faculty of Science, Department of Chemistry, University of Helsinki, Helsinki, Finlandia
- 14 D. Kharytonau "Corrosion Inhibition of Aluminum and Magnesium Alloys by Soluble Inorganic Inhibitors", Helmholtz Zentrum Hereon, Niemcy
- 15 D. Kharytonau "Corrosion Inhibition of Aluminum and Magnesium Alloys", Lulea University of Technology, Szwecja
- 16 M. Krzan “Surface properties of Saponin-Chitosan mixtures”, St. Clement of Ohrid University of Sofia, Bułgaria
- 17 A. Michna "Adsorption kinetics of growth factors on macroion multilayers- the impact of films on cell viability”, Clausthal University of Technology, Clausthal, Niemcy
- 18 A. Michna “Fibroblast growth factor 21- physiochemical properties of the protein and the impact on the fibroblast cell viability”, University of Ostrava, Czechy
- 19 E. Młyńczak "Fundamental electronic properties of epitaxial Fe(001) films grown on Au(001)", Uniwersytet w Białymstoku
- 20 M. Morga, P. Batys, D. Kosior, Z. Adamczyk "Adsorption of polypeptides (poly-L-lysine) at solid/liquid interfaces: experiments and modelling", Clausthal University of Technology, Niemcy

- 21 M. Morga, D. Kosior, M. Oćwieja, Z. Adamczyk "Mechanisms of Macroions/Nanoparticle Monolayers Formation: Electrokinetics Studies", University of Ostrava, Czechy
- 22 M. Nattich-Rak " Określenie mechanizmu tworzenia koron cząsteczek albuminy ludzkiej na powierzchni nośników polimerowych i krzemowych" w Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk w Łodzi
- 23 M. Oćwieja "Trendy w badaniach nad plazmonicznymi nanocząstkami srebra i złota", Wydział Chemii UJ
- 24 M. Oćwieja, "Wpływ właściwości powierzchniowych nanocząstek srebra i złota na ich aktywność biologiczną oraz potencjał aplikacyjny w nowoczesnych technikach spektroskopowych", IMIM PAN
- 25 A. Pacuła "Catalytic conversion of n-butanol in the presence of H₃PW₁₂O₄₀ deposited on porous carbon materials with different grain morphologies"; University of Cantabria, Santander, Hiszpania
- 26 A. Pomorska, A. Michna, D. Lupa, J. Odrobińska-Baliś, Sz. Zapotoczny, Z. Adamczyk "Modified Chitosan/Carrageenan Multilayers assembly at Silica", University of Ostrava, Czechy
- 27 A. Pomorska, A. Michna, Z. Adamczyk "Biomaterials adsorption and hydration studies by means of QCM-D", Clausthal University of Technology, Niemcy
- 28 M. Szaleniec, M. Glanowski, P. Wójcik, A. M. Wojtkiewicz, „Eksperyment bez teorii jest ślepy, teoria bez eksperymentu jest jedynie intelektualną zabawą. Czyli jak rozwikłaliśmy 50-letnią zagadkę dehydrogenazy 3-ketosterodowej”, Wydział Chemii UJ
- 29 M. Szaleniec „Sieci Neuronowe”, Łódzki Uniwersytet Medyczny
- 30 M. Zimowska „Zastosowanie elektronowej mikroskopii skaningowej w badaniach morfologii powierzchni” Wydział Inżynierii Mechanicznej i Robotyki, Akademia Górniczo-Hutnicza

SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU

WYKŁADY ZAPROSZONYCH GOŚCI

1. dr Taymaz Tabari, (Wydział Chemii UJ) "Design and engineering of active photoelectrodes for solar water splitting"
2. Piotr Gołkiewicz, przedstawiciel firmy Elsevier „Informacje dotyczące bazy Reaxys wraz z praktycznymi wskazówkami jej obsługi i wykorzystania”
3. dr Klemens Noga „Akademickie Centrum komputerowe Cyfronet AGH, Zasoby obliczeniowe ACK Cyfronet AGH”
4. Dr Olena Tynkevych, (Wydział Chemii UJ) “Synthesis and properties of nanoscale materials (CdTe QDs, Ag NPs, nanoporous metal oxides)”
5. dr hab. Łukasz Laskowski, prof. IFJ PAN „Dwuwymiarowy stały rozpuszczalnik – narzędzie do manipulacji własnościami układów molekularnych”
6. dr Sabina Podlewska (Instytutu Farmakologii PAN) “Machine learning in the serve of searching for new drugs”
7. Marijana Ponjavic (Institute of Molecular Genetics and Genetic Engineering) "Highlights from EcoPlastic (Eco conversion of lower grade PET and mixed recalcitrant PET plastic waste into high performing biopolymers) EU HE 101046758”

8. Sandra Vojnovic (Institute of Molecular Genetics and Genetic Engineering) "Highlights from BioECOLOGics (Value-added bioecologics through eco-sustainable routes) Science Fund, Republic of Serbia, 7730810"
9. dr Tamas Szabo (University of Szeged) "Langmuir-Blodgett and LbL deposition of graphene based conductive semitransparent coatings"
10. dr Diana Dołęga, Manager ds. Rozwoju w Jagiellońskim Centrum Innowacji „Usługi obrazowania w Jagiellońskim Centrum Innowacji”
11. dr inż. Tomasz Jarosz (Wydział Chemiczny, Politechnika Śląska) „Materiały wybuchowe zawierające stężony nadtlenek wodoru "zieloną" alternatywą dla dynamitów. Perspektywy rozwoju i wyzwania”
12. dr. Qingsheng Qi "Biosynthesis of bioplastics and biodegradation of waste plastics"
13. Prof. dr hab. Marek Kosmulski (Katedra Elektrotechniki i Elektrotechnologii Politechniki Lubelskiej) "A fascinating world of basic salts of copper"
14. Monika Klonowska „Przeciwdziałanie mobbingowi i dyskryminacji”
15. prof. dr hab. Leszek Sosnowski (Wydział Filozoficzny, UJ) "Tradycja jako warunek rozumienia"

WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU

1. dr hab. Magdalena Oćwieja, prof. IkiFP PAN "Badanie procesu adhezji komórek na warstewkach białkowych i polielektrolitowych z wykorzystaniem nowoczesnych metod optycznych"
2. dr hab. Jan Zawała, prof. IkiFP PAN "Istota udziału Instytutu w akcji HR Strategy for Researchers (HRS4R)"
3. dr Łukasz Kuterasiński "Multifunkcjonalne układy oparte na zeolitach o strukturach FAU, MFI oraz BEA jak również tlenku glinu typu gamma przygotowanych wybranymi metodami mokrej chemii"
4. dr Dmitry Kharitonov "Corrosion inhibition of aluminum and magnesium alloys by soluble inorganic inhibitors"
5. dr Maria Morga "Określenie mechanizmów adsorpcji i właściwości monowarstw polipeptydów na powierzchniach substratów stałych"
6. dr Anna Pajor-Świerzy „Materiały przewodzące na bazie nanocząstek bimetalicznych typu „core@shell” do zastosowania w przemyśle elektronicznym”
7. dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IkiFP PAN "Jak napisać atrakcyjne CV"
8. dr Andrzej Baliś "Spinning drop tensiometer measurements"

UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE

DOKTORA HABILITOWANEGO

- 1 Małgorzata Zimowska „Funkcjonalizowane porowate materiały hybrydowe na osnowie krzemianów warstwowych do procesów katalitycznych zrównoważonego rozwoju”

DOKTORA

- **dziedzina nauk ścisłych i przyrodniczych., dyscyplina: nauki chemiczne**

1. Agnieszka Czakaj “Liquid foams stabilised by cellulose nanocrystals” (promotor prof. dr hab. inż. Piotr Warszyński, promotor pomocniczy dr Marcel Krzan)
2. Michał Głanowski „Modelowanie mechanizmu reakcji bakteryjnych dehydrogenaz ketosteroidowych – katalizatorów do modyfikacji leków steroidowych” (promotorzy: prof. dr hab. Maciej Szaleniec, prof. dr hab. Andrzej Bojarski)
3. Katarzyna Haraźna „Charakterystyka fizykochemiczna i biologiczna poli(3-hydroksyoktanianu) modyfikowanego diklofenakiem – zastosowanie w procesach regeneracji tkanki kostnej oraz skóry” (promotorzy: dr hab. Maciej Guzik, prof. dr hab. Andrzej Bojarski)
4. Joanna Kaim „Uwodornienie i dekarbonylacja furfuralu na katalizatorach tlenkowych zawierających Cu i Ni” (promotor dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IkiFP PAN, promotor pomocniczy: dr Michał Śliwa)
5. Patrycja Obara „Badanie oddziaływania niekanonicznych form telomerowych fragmentów DNA z nanorurkami węglowymi przy zastosowaniu metod dynamiki molekularnej” (promotor prof. dr hab. Tomasz Pańczyk, promotor pomocniczy dr Paweł Wolski)
6. Natalia Ogrodowicz „Dehydratacja alkoholi z udziałem katalizatorów nośnikowych zawierających heteropolikwasy typu Keggina i Wells-Dawsona” (promotor dr hab. Anna Micek-Ilnicka)
7. Justyna Prajsnar „Opracowanie ścieżki chemicznej oraz enzymatycznej modyfikacji grupy aminowej kwasu 6-aminopenicylanowego poprzez wprowadzenie do cząsteczki 3-hydroksykwasów pochodzenia bakteryjnego” (promotorzy: dr hab. Maciej Guzik, prof. dr hab. Andrzej Bojarski)
8. Wojciech Snoch „Nowe estry cukrów i kwasów (R)-3-hydroksyalkanowych – synteza, charakterystyka fizykochemiczna oraz ocena potencjału biologicznego” (promotorzy: dr hab. Maciej Guzik, prof. dr hab. Andrzej Bojarski, promotor pomocniczy dr Jakub Staroń)
9. Anna Walczyk “Solid base materials derived from sepolite and talc by dry milling and alkali activation” (promotorzy: prof. dr hab. Ewa Serwicka-Bahranowska, prof. dr hab. inż. Maciej Sitarz)
10. Agata Wiertel-Pochopień „Wpływ dynamicznej warstwy adsorpcyjnej na stabilność filmów zwilżających, w jedno- i dwuskładnikowych roztworach substancji powierzchniowo-aktywnych” (promotor dr hab. Jan Zawała)
11. Agnieszka Winiarska “Tungsten aldehyde oxidoreductase from *Aromatoleum aromaticum* - biocatalyst for alcohol production” (promotorzy prof. dr hab. Maciej Szaleniec, dr hab. Anna Bodzoń-Kułakowska, prof. AGH)

KONFERENCJE NAUKOWE ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT

- 1 LV Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (LV Polish Annual Conference on Catalysis), Kraków 22-24 marca 2023 (P. Warszyński, D. Rutkowska-Żbik)
- 2 15th European Congress of Catalysis EuropaCat-15 „A Pilar for Modern Chemistry”, 27.08-01.09.2023, Praga. Komitet Organizacyjny wyłoniony przez EFCATS (European Federation of Catalysis Societies): Polski Klub Katalizy (dr hab. R. Tokarz-Sobieraj, prof. IKiFP PAN, dr hab. D. Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN), Czech Catalysis Group of the Czech Chemical Societies, Slovak Catalysis Society, Hungarian Catalysis Society.

IMPREZY POPULARNO NAUKOWE ZORGANIZOWANE W INSTYTUCIE

1. Dzień Otwarty IKiFP PAN, Kraków, 29 września 2023 r. (M.Nattich-Rak)

WYRÓŻNIENIA I NAGRODY

1. M. Witko Chairwoman 15th European Congress of Catalysis - EuropaCat-15 „A Pilar for Modern Chemistry” 27.08-01.09.2023, Praga, Czechy; drugi wybór na głównego chairmena międzynarodowej konferencji po 1997 roku kiedy chairmen był śp. prof. J. Haber
2. M. Witko – Nagroda Ministra Edukacji i Nauki za całokształt dorobku naukowego, dydaktycznego, organizacyjnego i popularyzatorskiego
3. W. Łasocha - wybór na członka Komitetu Krystalografii PAN
4. M. Szaleniec - wybór na członka Komitetu Chemii PAN
5. M. Szaleniec - wybór na członka Rady Programowej Klastra Life Science
6. M. Witko – wybór na TM (Titular member) of IUPAC
7. B. Jachimska - członkostwo z nominacji American Chemical Society (ACS)
8. B. Jachimska - członkostwo z nominacji „Stowarzyszenie TOP500 Innovators” patronat MNiSW, The Association of TOP 500 Innovators since 2015
9. B. Jachimska - członkostwo z nominacji Member of Bioelectrochemical Society (BES) since 2005
10. B. Jachimska - członkostwo z nominacji Member of the International Society of Electrochemistry (ISE)
11. M. Szaleniec - wybór na członka Sektorowej Rady ds. Kompetencji Sektora Chemicznego
12. B. Jachimska - wyróżnienie prezentacji ustnej w trakcie konferencji American Chemical Society meeting 2023, B. Jachimska, P. Komorek, K. Rakowski, M. Szota “Conformational Stability of Bovine Serum Albumin as a Result of Interactions with Gold Surface” ACS Fall 2023, American Chemical Society National Meeting, San Francisco 2023
13. M. Szota - wyróżnienie prezentacji ustnej M. Szota, B. Jachimska „Dendrymer G4.0PAMAM jako efektywny nanoonośnik leków przeciwnowotworowych” V Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały - od teorii do aplikacji, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Toruń, 2023
14. K. Rakowski - wyróżnienie prezentacji ustnej K. Rakowski, P. Mulheran, K. Kubiak-Ossowska, B. Jachimska "Effect of Tau protein phosphorylation on the process of its adsorption

on the neuronal membrane", Book of Abstracts, 5th International Wroclaw Scientific Meeting, Wrocław, Polska 2023

15. D. Kharytonau - wyróżnienie "2022 RSC Advances outstanding peer reviewer" przez czasopismo RSC Advances. <https://www.rsc.org/journals-books-databases/author-and-reviewer-hub/reviewer-information/outstanding-peer-reviewers/2022/rsc-advances/>
16. M. Zimowska, M. Śliwa, J. Gurgul, R.P. Socha - Nominacja w kategorii: Best Researcher Award ogłoszonej przez platformę Science za publikację; M. Zimowska*, M. Śliwa, H. Palkova, J. Gurgul, R. P. Socha „Microwave treatment effect on the enhanced basicity of porous clay heterostructured composites derived from Laponite”, Applied Surface Science 619 (2023) 156768, <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2023.156768>