

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

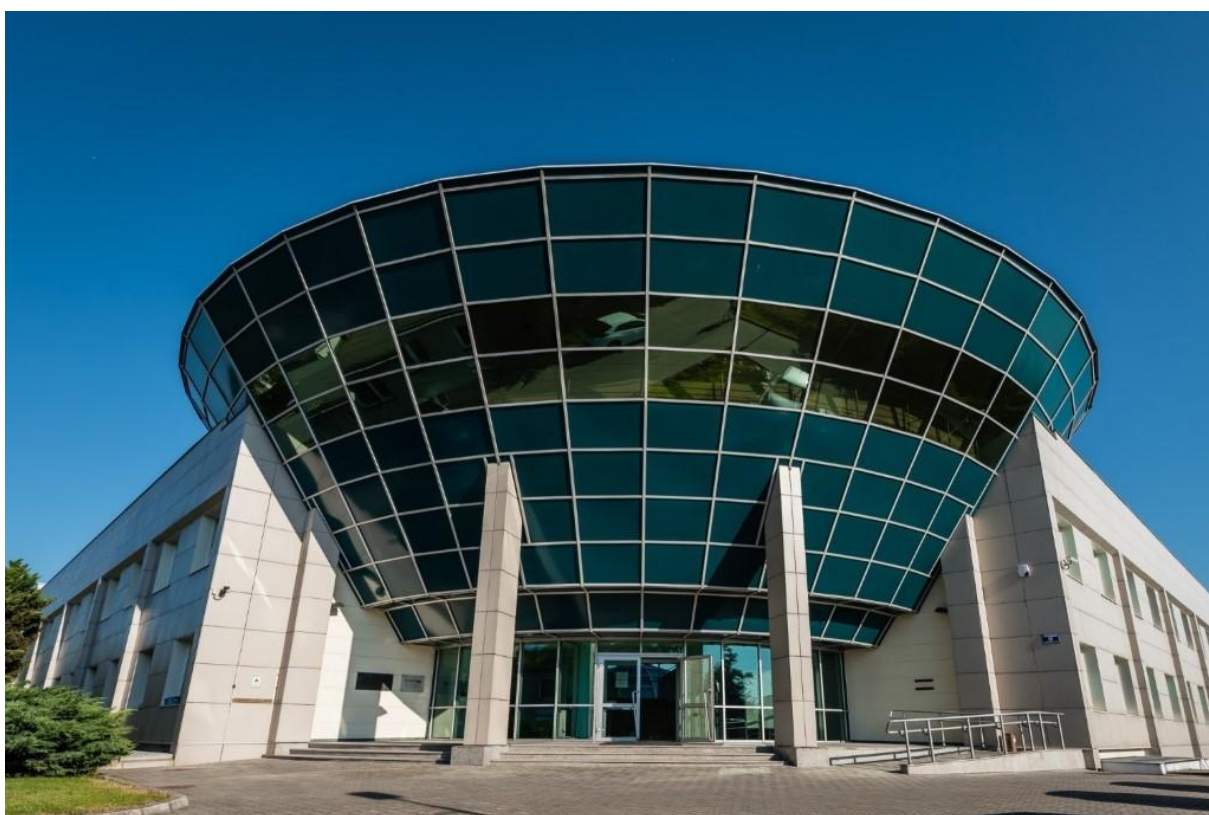


Leading National  
Research Centers



HR EXCELLENCE IN RESEARCH

**SPRAWOZDANIE  
Z DZIAŁALNOŚCI BADAWCZEJ INSTYTUTU  
W ROKU 2024**



**Kraków, marzec 2025**



## Spis treści

|                                                                                                                                    |            |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>CHARAKTERYSTYKA I KIERUNKI BADAWCZE INSTYTUTU KATALIZY I FIZYKOCHEMII POWIERZCHNI im. JERZEGO HABERA POLSKIEJ AKADEMII NAUK</b> | <b>4</b>   |
| <b>ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2024</b>                                                                                    | <b>9</b>   |
| <b>SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2024:</b>                                                                    | <b>13</b>  |
| <b>DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU</b>                                                                                             | <b>15</b>  |
| Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju                                                                        | 17         |
| Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej                                                                           | 23         |
| Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury                                                                                        | 37         |
| Grant Rozwojowy                                                                                                                    | 41         |
| Projekty badawcze NCN „Sonata Bis”                                                                                                 | 45         |
| Projekty badawcze NCN „Sonata”                                                                                                     | 49         |
| Projekty badawcze NCN „Opus”                                                                                                       | 55         |
| Projekty badawcze NCN „Sonatina”                                                                                                   | 73         |
| Projekty badawcze NCN „Preludium Bis”                                                                                              | 79         |
| Projekty badawcze NCN „Preludium”                                                                                                  | 83         |
| Projekty badawcze NCN „Beethoven Life”                                                                                             | 89         |
| Projekty badawcze NCN „Solar-Driven Chemistry”                                                                                     | 93         |
| Projekty badawcze NCN „GRIEG”                                                                                                      | 97         |
| Projekty badawcze NCN „Miniatura”                                                                                                  | 101        |
| Projekty badawcze NCN „Polonez Bis”                                                                                                | 107        |
| Projekty NCBR „TANGO”                                                                                                              | 111        |
| Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej                                                                                    | 115        |
| Programy HORYZONT                                                                                                                  | 119        |
| Inne międzynarodowe projekty badawcze                                                                                              | 125        |
| Projekty programu Erasmus+                                                                                                         | 129        |
| <b>Dorobek publikacyjny instytutu za rok 2024</b>                                                                                  | <b>133</b> |
| <b>PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM</b>                                                                                             | <b>135</b> |
| <b>OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ</b>                                                                                            | <b>168</b> |
| <b>UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH</b>                                                                               | <b>169</b> |
| <b>WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH</b>                                                                            | <b>188</b> |
| <b>SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU</b>                                                                                                 | <b>189</b> |
| <b>UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE</b>                                                                                           | <b>191</b> |

# **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 (IKiFP PAN) prowadzi zaawansowane badania interdyscyplinarne w obszarze nauk ścisłych i przyrodniczych, poszerzając rozumienie otaczającego nas świata oraz tworząc innowacyjne rozwiązania dla gospodarki i społeczeństwa. 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 i realizowane są w sposób zapewniający optymalne wykorzystanie infrastruktury oraz surowców i zasobów. 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 ukierunkowana na opracowanie nowych nanomateriałów do zastosowań diagnostycznych i terapeutycznych. W Instytucie badania podstawowe i stosowane współlistnieją i wzajemnie się uzupełniają. Dzięki współpracy z otoczeniem społeczno-gospodarczym prowadzone prace badawcze nastawione są na rozwiązywanie praktycznych, aktualnych i ważnych dla społeczeństwa problemów.

Kadra Instytutu to 132 pracowników, w tym około 93 jest bezpośrednio zaangażowanych w prowadzenie prac badawczych. Ponadto, w badaniach uczestniczy kilkunastu doktorantów, kształcących się w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej (KISD). IKiFP PAN, uhonorowany przez Komisję Europejską nagrodą HR Excellence in Research Award, w uznaniu ciągłego zaangażowania na rzecz wdrażania zasad Europejskiej Karty Naukowca (The European Charter for Researchers - ECR) oraz Kodeksu Postępowania przy Rekrutacji Naukowców (Code of Conduct for the Recruitment of Researchers - CCER), w pełni wspiera i stosuje politykę otwartej, przejrzystej i merytorycznej rekrutacji (OTM-R). Zgodnie z powyższym, wszystkie rekrutacje w Instytucie prowadzone są za pośrednictwem platformy EURAXESS, co powoduje, że wśród kadry naukowej IKiFP PAN systematycznie wzrasta liczba obcokrajowców.

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. 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. W laboratoriach biorafinerii, z wykorzystaniem procesów fermentacji przy udziale odpowiednio dobranych mikroorganizmów, produkowane są bioplastiki 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 w zakresie fizykochemii powierzchni układów zdyspergowanych prowadzonych w Instytucie 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 (pomiaru kinetyki adsorpcji lub dynamiki przepływu cząstek koloidalnych) jak i teoretycznych (symulacje procesu adsorpcji, struktury i właściwości warstw adsorpcyjnych, głównie 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 (bio)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 2024 było m.in. otrzymanie zoptymalizowanych układów dendrymerowych z unieruchomionymi substancjami leczniczymi oraz potwierdzenie immobilizacji leku w nośniku za pomocą symulacji metodami dynamiki molekularnej. Badania biologiczne *in vitro* wykazały istotny potencjał terapeutyczny otrzymanych układów, w tym aktywność przeciwnowotworową wobec komórek czerniaka złośliwego, potwierdzający możliwość zastosowania opracowanych kompleksów w terapii onkologicznej. W zakresie badań o charakterze aplikacyjnym należy wymienić dalsze udoskonalenia zintegrowanej platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie kulturowym HERIE, w której zaktualizowano 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. Aktualne badania wykazały, że istniejące przekonanie o możliwości znacznego ograniczenia depozycji cząstek pyłu poprzez ogrzanie powierzchni nie jest prawdziwe dla typowych powierzchni architektonicznych. Opracowany 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, pozwalając porównywać obiekty pod kątem korelacji zabrudzeń z rodzajem stosowanego ogrzewania.

## **Kształcenie**

W roku 2024 Instytut kształcił doktorantów wyłącznie w ramach Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkoły Doktorskiej (KISD) we współpracy z Instytutem Fizyki Jądrowej PAN, Instytutem Farmakologii PAN, Instytutem Metalurgii i Inżynierii Materiałowej PAN, Wydziałem Fizyki i Informatyki Stosowanej oraz Wydziałem Inżynierii Materiałowej Akademii Górniczo-Hutniczej, Instytutem Mechaniki Górotworu PAN i Instytutem Gospodarki Surowcami Mineralnymi i Energią PAN, jak również w ramach Szkoły Doktorskiej 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 wpierania krótkookresowej wymiany akademickiej PROM finansowanym przez Narodową Agencję Wymiany Akademickiej, którego celem jest zwiększenie stopnia umiędzynarodowienia kształcenia doktorantów oraz aktywności naukowej IKiFP PAN. W ramach programu PROM z możliwości dofinansowania wyjazdów na staże i konferencje naukowe skorzysta ok. 16 doktorantów i ok. 13 członków kadry naukowej IKiFP PAN. Program sfinansuje również badania naukowe, prowadzone pod kierownictwem pracowników IKiFP PAN, około 17 doktorantom z zagranicznych jednostek partnerskich.

W 2024 roku pracownicy Instytutu aktywnie opiekowali się i przekazywali swoją wiedzę 45 młodym naukowcom, odbywającym staże oraz praktyki studenckie w IKiFP PAN. Ponadto przedstawiciele kadry naukowej IKiFP PAN byli opiekunami realizowanych wspólnie z uczelniami wyższymi 9-ciu prac magisterskich i licencjackich. Ponadto, prowadzili wykłady kursowe na uczelniach wyższych takich jak Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, Uniwersytet Jagielloński, Politechnika Krakowska i Akademia Sztuk Pięknych w Krakowie.

## **Współpraca krajowa i międzynarodowa**

Miarą wysokiej międzynarodowej pozycji Instytutu są wspólne publikacje, wystąpienia konferencyjne oraz wymiana naukowa kadry pomiędzy IKiFP PAN a zewnętrznymi naukowymi instytucjami partnerskimi. Średnio 40% (średnio 60 sztuk) publikowanych jest we współpracy z partnerami zagranicznymi z całego świata, w ramach kooperacji wspieranej m.in. ze środków na współpracy bilateralne, akcje COST, programy ramowe EC, programy operacyjne, ERASMUS+ oraz NAWA.

Instytut intensyfikuje wykorzystanie swojej infrastruktury badawczej organizując wspólne laboratoria z szeregiem ośrodków badawczych. Przykładami wspólnie powołanych laboratoriów są m. in.: Centrum Badania Powierzchni i Nanostruktur, Laboratorium Elektrochemii i Fizykochemii Powierzchni, Interdyscyplinarne Centrum Nauk Fizycznych, Chemicznych, Medycznych i Biologicznych (ICNFCMB), Narodowe Laboratorium Badania Powierzchni, Krajowe Centrum Nanostruktur Magnetycznych do Zastosowań w Elektronice Spinowej SPINLAB, 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 szczyci 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 2024 uczestniczyli w organizacji 6<sup>th</sup> *Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry* oraz 7<sup>th</sup> *International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface*. Obie konferencje odbyły się w Krakowie.

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"; członkowstwo w scientific advisory board "Journal of Colloid Interface Science", "Catalysis Letters", "Topics in Catalysis", "Surface Innovations" oraz "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 i kompleksowym remontem sali audytoryjnej) 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. Ostatni Dzień Otwarty odbył się 29 września 2023 r. Podczas tego wydarzenia wygłoszono 5 wykładów, zaprezentowano 12 doświadczeń tematycznych i zorganizowano wizyty w nowo otwartym Laboratorium Rozwoju Bioprocessów do wytwarzania zaawansowanych materiałów kompozytowych. Tego dnia Instytut odwiedziło około 550 osób m.in. ze 6 szkół podstawowych i 4 liceów. W roku 2024 Instytut nie organizował Dnia Otwartego, ale jego przedstawiciele brali czynny udział w organizacji i demonstracjach ciekawych pokazów chemicznych oraz prowadzeniu wykładów w ramach Festiwalu Nauki w Krakowie (16-18.05.2024).

Pracownicy Instytutu biorą również regularnie czynny udział w przedsięwzięciach organizowanych przez Klaster Life-Science takich jak Life Science Open Space czy Dzień Otwarty Klastra Life-Science, a w dniach 9-10 czerwca 2024 r., czynny udział w Kongresie "Nauka dla Społeczeństwa", który odbył się w Warszawie. W 2024 roku pracownicy IKiFP PAN promowali prowadzone przez siebie badania naukowe uczestnicząc w wielu wydarzeniach branżowych (głównie konferencje i targi technologiczne). Dzięki tym platformom osiągnąć kadry naukowej Instytutu mogą

stać się podstawą budowania współpracy między sektorem akademickim a przemysłowym, a także angażowania społeczeństwa w proces tworzenia wiedzy.

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. Konkursy cieszą się niesłabnącą popularnością. W 2024 roku odbyła się VIII edycja konkurs o Nagrodę im Jerzego Habera i 3 edycja konkursu o Nagrodę im. Andrzeja Pomianowskiego - w obu konkursach przyznano po 3 nagrody. Uroczyste wręczenie dyplomów miało miejsce podczas grudniowego posiedzenia Rady Naukowej IKiFP PAN.

Instytut od kilku lat aktywnie działa w mediach społecznościowych. Wizerunek Instytutu kreowany jest w serwisie LinkedIn oraz na Facebooku. Za pomocą mediów społecznościowych Instytut dostarcza najświeższe informacje i aktualności oraz informuje opinię publiczną o ofercie i najnowszych osiągnięciach.

## **ZADANIA BADAWCZE REALIZOWANE W ROKU 2024**

### **DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU**

#### **Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju 17**

1. Badania doświadczalne i obliczeniowe nad wybranymi enzymami o potencjale aplikacyjnym 19
2. Biopolimery bakteryjne jako źródło hydroksykwasów do zastosowania jako komponenty typu HBD do wytwarzania cieczy głęboko eutektycznych (DES). 20
3. Nowe perokso- oraz poliokso- związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania 21
4. Azotek boru jako katalizator i nośnik fazy aktywnej 22

#### **Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej 23**

5. Fluorescencyjne monowarstwy nanoklastrów metali o kontrolowanej strukturze oraz właściwościach elektrokinetycznych otrzymywane na powierzchniach nośników koloidalnych 25
6. Właściwości fizykochemiczne i mechaniczne układów „bio” 26
7. Właściwości strukturalne, elektronowe i magnetyczne nanostruktur badane technikami mikroskopowymi i spektroskopowymi w warunkach ultra wysokiej próżni 27
8. Modelowanie komputerowe wytwarzania zdegradowanych powierzchni plastików przy użyciu reaktywnej dynamiki molekularnej 28
9. Cząsteczki sacharydów pod wpływem zewnętrznych sił mechanicznych: obliczenia teoretyczne 29
10. Określenie mechanizmów syntezy, struktury i właściwości transportowych wielowarstw cząstek koloidalnych na powierzchniach stałych 30
11. Teranostyczne nanocząstki substancji przeciwnowotworowych 31
12. Kinetyka koalescencji w emulsjach wodno-wodnych 32
13. Naturalne i modyfikowane polisacharydy jako stabilizatory filmów powierzchniowych, pian i emulsji 33
14. Wpływ silnego odkształcenia Mg na właściwości warstw fosforanowych 34
15. Molekularne aspekty stabilności konformacyjnej białek w kontekście tworzenia superstruktur amyloidowych 35

#### **Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury 37**

16. Ilościowa ocena zagrożenia obiektów zabytkowych przez warunki środowiska w ich otoczeniu 39

#### **Grant Rozwojowy 41**

1. Enzymatyczna synteza aktywnych biologicznie regioselektywnie odwodornionych triterpenów pentacyklicznych 43
2. Hybrydowe kompozyty mineralne otrzymywane metodą heterokoagulacji, jako efektywne nanomateriały wychwytywania CO<sub>2</sub> 44

|                                                                                                                                                                                                                                      |           |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Projekty badawcze NCN „Sonata Bis”</b>                                                                                                                                                                                            | <b>45</b> |
| 1. Synergistyczne efekty mieszanych roztworów bio-surfaktantów w stabilności filmów ciekłych w warunkach dynamicznych- badania podstawowe o potencjale aplikacyjnym we flotacyjnym procesie separacji                                | 47        |
| 2. Topologia spotyka magnetyzm: związki na bazie Sn dla sterowanych magnetyzacją przejść topologicznych (TopoTin)                                                                                                                    | 48        |
| <b>Projekty badawcze NCN „Sonata”</b>                                                                                                                                                                                                | <b>49</b> |
| 1. Od pojedynczej cząsteczki do inteligentnego materiału - zrozumienie tworzenia się i właściwości kompleksów polipeptydów                                                                                                           | 51        |
| 2. Udoskonalenie przewodnictwa drukowanych ścieżek poprzez optymalizację procesu syntezy oraz właściwości fizykochemicznych nanocząstek metali                                                                                       | 52        |
| 3. Nanohybrydowe układy zawierające tlenek grafenu oraz nanocząstki jako funkcjonalne komponenty dla nowego typu biosensorów                                                                                                         | 53        |
| 4. Oddziaływania liposacharydów bakteryjnych z „X” kształtnymi oligomerami peptydowymi na granicy faz: Czynniki-X w strategii przeciwdrobnoustrojowej?                                                                               | 54        |
| <b>Projekty badawcze NCN „Opus”</b>                                                                                                                                                                                                  | <b>55</b> |
| 1. Nowe biomateriały zawierające polisacharydy jako efektywna platforma do adsorpcji i uwalniania czynników wzrostu fibroblastów: zastosowania w diagnostyce i w leczeniu chorób cywilizacyjnych                                     | 57        |
| 2. Nowe kompozyty smektytów z nanocząstkami TiO <sub>2</sub> otrzymanymi metodą odwróconej mikroemulsji do zastosowań fotokatalitycznych                                                                                             | 58        |
| 3. Gruboziarniste modelowanie węglowodanów                                                                                                                                                                                           | 59        |
| 4. Funkcjonalne warstwy i nanostruktury otrzymywane przy pomocy epitaksji z wiązek molekularnych wspomaganej zewnętrznymi czynnikami                                                                                                 | 60        |
| 5. Teranostyczne nanonośniki nowej generacji dla detekcji, diagnostyki i neuroprotektynowego leczenia niedokrwiennych uszkodzeń mózgu                                                                                                | 61        |
| 6. Opracowanie podstaw szybkiej i taniej fizykochemicznej metody detekcji zanieczyszczeń wody, opartej na monitorowaniu dynamicznych właściwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz                                                 | 62        |
| 7. Stany wzbudzone pod szkłem powiększającym -adaptacja metod opartych na analizie gęstości do badania molekularnych elektronowych stanów wzbudzonych                                                                                | 63        |
| 8. Struktura i Funkcja Korony Białkowej na Powierzchni Nanocząstek                                                                                                                                                                   | 64        |
| 9. Nowa generacja surfaktantów wieloładunkowych o dedykowanej funkcjonalności                                                                                                                                                        | 65        |
| 10. Mechanizmy cyklizacji związków czynnych biologicznie katalizowane przez enzymy zależne od żelaza                                                                                                                                 | 66        |
| 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 | 67        |
| 13. Wolframowa Oksydoreduktaza Aldehydów - nowa hydrogenaza. Badania mechanizmu reakcji i potencjalnych zastosowań biokatalitycznych.                                                                                                | 69        |
| 14. System biochemiczny mikrośrodowiska trichomów wydzielniczych, jego właściwości biokatalityczne i potencjał w biotechnologii                                                                                                      | 70        |

|                                                                                                                                                                                                                                 |            |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 15. Badania nad kooperacją jonów metali w dwuatomowych centrach złożonych z jonów metali przejściowych                                                                                                                          | 71         |
| 16. Strategie prewencji konserwatorskiej dla obiektów z poli(chloru winylu)                                                                                                                                                     | 72         |
| <b>Projekty badawcze NCN „Sonatina”</b>                                                                                                                                                                                         | <b>73</b>  |
| 1. Multifunkcjonalne kompozytowe powłoki chitozanowe dla biodegradowalnych stopów Mg                                                                                                                                            | 75         |
| 2. Wytwarzanie nowej generacji trójwymiarowych materiałów ‘drug-on-chip’ o kontrolowanym uwalnianiu substancji aktywnych dedykowanych medycynie spersonalizowanej                                                               | 76         |
| 3. Rozszyfrowanie niewiadomej- struktura i funkcja białka Nif3                                                                                                                                                                  | 77         |
| <b>Projekty badawcze NCN „Preludium Bis”</b>                                                                                                                                                                                    | <b>79</b>  |
| 1. Wpływ funkcjonalizacji powierzchni nanocząstek metali i tlenków metali polifenolami niskocząsteczkowymi na ich aktywność w procesach fibrylizacji białek                                                                     | 81         |
| 2. Precyzyjne dostrajanie właściwości kompleksów polielektrolitów poprzez trójskładnikową kompozycję                                                                                                                            | 82         |
| <b>Projekty badawcze NCN „Preludium”</b>                                                                                                                                                                                        | <b>83</b>  |
| 1. Analiza wpływu wybranych czynników na zmiany struktury $\alpha$ -synukleiny                                                                                                                                                  | 85         |
| 2. Opracowanie racjonalnych wytycznych środowiskowych na potrzeby krótko-trwałych wydarzeń religijnych, kulturalnych i komercyjnych w budynkach zabytkowych                                                                     | 86         |
| 3. Synergistyczne układy spieniające oparte na modyfikowanych powierzchniowo nanocząstkach magnetycznych i biodegradowalnych surfaktantach aminokwasowych w kontrolowanej destabilizacji pian rzeczywistych w polu magnetycznym | 87         |
| <b>Projekty badawcze NCN „Beethoven Life”</b>                                                                                                                                                                                   | <b>89</b>  |
| 1. Struktura i funkcja enzymów glicynowo-rodnikowych katalizujących addycję do fumaranu: biochemia, modelowanie i zastosowanie                                                                                                  | 91         |
| <b>Projekty badawcze NCN „Solar-Driven Chemistry”</b>                                                                                                                                                                           | <b>93</b>  |
| 1. SolarMethaChem: Procesy wywołane światłem słonecznym dla fotochemicznej konwersji metanu                                                                                                                                     | 95         |
| <b>Projekty badawcze NCN „GRIEG”</b>                                                                                                                                                                                            | <b>97</b>  |
| 1. Craquelure – Model obrazów ze spękaniem wspierający ustalenie racjonalnych wytycznych środowiskowych w muzeach                                                                                                               | 99         |
| 2. Teranostyczne nanonośniki dla dostarczania leków w chorobach centralnego układu nerwowego                                                                                                                                    | 100        |
| <b>Projekty badawcze NCN „Miniatura”</b>                                                                                                                                                                                        | <b>101</b> |
| 1. Termoczułe emulsje wodno-wodne do zastosowań biomedycznych stabilizowane kopolimerami                                                                                                                                        | 103        |
| 2. Stabilność i własności fizykochemiczne pian wytwarzanych na bazie mieszanin związków powierzchniowo czynnych i polielektrolitów                                                                                              | 104        |
| 3. Wpływ nanokrystalizacji Mg na strukturę i odporność korozyjną fosforanowych warstw konwersyjnych do zastosowań biomedycznych                                                                                                 | 105        |
| 4. Opracowanie metodologii otrzymywania spienionego materiału hydrożelowego: opis procesów formowania i charakterystyka otrzymanych struktur                                                                                    | 106        |

|                                                                                                                                                                                                                     |            |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>Projekty badawcze NCN „Polonez Bis”</b>                                                                                                                                                                          | <b>107</b> |
| 1. Proste metody syntezy przyszłych, niekonwencjonalnych materiałów plazmonicznych posiadające centra mono-atomowe i bimetaliczne dla zrównoważonych procesów wytwarzania H <sub>2</sub> i redukcji CO <sub>2</sub> | 109        |
| <b>Projekty NCBR „TANGO”</b>                                                                                                                                                                                        | <b>111</b> |
| 1. Opracowanie funkcjonalnej formy aplikacji estrów cukrowych kwasów tłuszczowych na bazie bakteryjnych polihydroksyalkanianów hamujących rozwój komórek nowotworowych                                              | 113        |
| <b>Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej</b>                                                                                                                                                              | <b>115</b> |
| 1. PROM Międzynarodowa wymiana stypendialna doktorantów i kadry akademickiej                                                                                                                                        | 117        |
| 2. Nanoosiłki do dostarczania leków z fotosurfaktantami i polielektrolitami                                                                                                                                         | 118        |
| <b>Programy HORYZONT</b>                                                                                                                                                                                            | <b>119</b> |
| 1. IPERION-HS - Zintegrowane platformy dla europejskiej infrastruktury badawczej w nauce o dziedzictwie                                                                                                             | 121        |
| 2. NanoPaInt - Dynamika gęstych nanosuspensji: droga do nowych funkcjonalnych materiałów                                                                                                                            | 122        |
| 3. NewCat - Monooksygenazy polisacharydów katalizujące reakcje typowe dla cytochromów P450                                                                                                                          | 123        |
| 4. GoGreen: green strategies to conserve the past and preserve the future of cultural heritage                                                                                                                      | 124        |
| <b>Inne międzynarodowe projekty badawcze</b>                                                                                                                                                                        | <b>125</b> |
| 1. Bioplastics upcycling loop (BioPolyCycle)                                                                                                                                                                        | 127        |
| 2. Organosmektyty dotowane kationami nieorganicznymi jako adsorbenty o kontrolowanej hydrofilowości/hydrofobowości                                                                                                  | 128        |
| <b>Projekty programu Erasmus+</b>                                                                                                                                                                                   | <b>129</b> |
| <b>PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM</b>                                                                                                                                                                              | <b>135</b> |
| <b>OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ</b>                                                                                                                                                                             | <b>168</b> |
| <b>UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH</b>                                                                                                                                                                | <b>169</b> |
| <b>WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH</b>                                                                                                                                                             | <b>188</b> |
| <b>SEMINARIA NAUKOWE INSTYTUTU</b>                                                                                                                                                                                  | <b>189</b> |
| <b>UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE</b>                                                                                                                                                                            | <b>191</b> |

## **SYNTEZA NAJWAŻNIEJSZYCH OSIĄGNIĘĆ INSTYTUTU W ROKU 2024:**

|                            |                                                                                                                                                                                                             |
|----------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| realizowano:               | 16 statutowych zadań badawczych<br>2 granty rozwojowe IKiFP PAN<br>40 projektów badawczych (grantów) NCBR, NCN<br>2 projekty NAWA<br>4 projekty UE Horyzont<br>3 inne projekty międzynarodowe               |
| opublikowano:              | 146 publikacji w czasopismach recenzowanych z listy JCR<br>1 publikacji w innych czasopismach,<br>158 streszczeń referatów i komunikatów w materiałach konferencyjnych                                      |
| wydano nakładem Instytutu: | 3 książkowe materiały konferencyjne z nr ISBN                                                                                                                                                               |
| wyłożono i zaprezentowano: | 115 referatów (w tym 15 referatów plenarnych i na zaproszenie) oraz zaprezentowano 95 posterów                                                                                                              |
| otrzymano:                 | 2 patenty (3 zgłoszeń patentowych)                                                                                                                                                                          |
| we współpracy z zagranicą: | opublikowano 57 wspólnych prac w czasopismach naukowych<br><br>ogłoszono 47 komunikatów w materiałach konferencyjnych<br>zrealizowano 10 wyjazdów pracowników i doktorantów Instytutu za granicę (Erasmus+) |
| (współ)zorganizowano:      | 1 konferencje krajową<br>4 konferencje międzynarodowe                                                                                                                                                       |
| uzyskano:                  | Tytuł profesora – 1 osoba<br>Stopień doktora habilitowanego – 5 osób<br>Stopień doktora - 5 osób                                                                                                            |

## WAŻNIEJSZE OSIĄGNIĘCIA NAUKOWE W ROKU 2024

- wyniki uzyskane w ramach projektów/ zadań badawczych

### **Opracowanie podstaw fizykochemicznej metody do oceny jakości wody, "OPUS" NCN 2021/43/B/ST8/00053, prof. dr hab. Jan Zawala**

Opracowano prototyp urządzenia, pozwalającego na detekcję zanieczyszczeń powierzchniowo-aktywnych w wodach powierzchniowych i przemysłowych, którego zasada działania opiera się na monitorowaniu zmian właściwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz w warunkach dynamicznych. Powstały prototyp pozwala na prowadzenie przesiewowej oceny jakości wody w sposób automatyczny, szybki i tani, bez konieczności przeprowadzania bardziej złożonych i angażujących dodatkowe odczynniki chemiczne procedur.

### **Struktura i funkcja korony białkowej na powierzchni nanocząstek, "OPUS" NCN 2021/41/B/ST5/02233, prof. dr hab. Barbara Jachimska**

Zoptymalizowano układy dendrymerowe z unieruchomionymi substancjami leczniczymi. Symulacje dynamiki molekularnej potwierdziły mechanizm immobilizacji leku w nośniku. Badania biologiczne *in vitro* wykazały ich istotny potencjał terapeutyczny, w tym aktywność przeciwnowotworową wobec komórek czerniaka złośliwego. Wyniki te potwierdzają możliwość zastosowania opracowanych kompleksów w terapii onkologicznej.

- 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 metodykę oceny wpływu warunków środowiskowych na szybkość brudzenia zabytkowych powierzchni w budynkach sakralnych. Określono kluczowe parametry narastania zabrudzeń oraz oszacowano udział wewnętrznych i zewnętrznych źródeł pyłu osiadającego rocznie. Metodyka pozwala porównywać obiekty pod kątem korelacji zabrudzeń z rodzajem stosowanego ogrzewania.

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

### **Opracowanie naturalnych rozpuszczalników głęboko eutektycznych jako ekologicznych alternatyw dla toksycznych rozpuszczalników stosowanych w przemyśle, dr hab. Maciej Guzik**

Opracowano protokoły syntezy, charakterystyki i optymalizacji naturalnych rozpuszczalników głęboko eutektycznych (NADES) do ekstrakcji. Skupiono się na stabilności termicznej, niskiej lepkości i kontroli hydrofobowości. Wykazano ich potencjał jako zielonych, biodegradowalnych i nietoksycznych rozpuszczalników przemysłowych. Udowodniono, że opracowane NADES, dzięki możliwości dostosowania właściwości, mogą stanowić alternatywę dla tradycyjnych rozpuszczalników.

### **Opracowanie nanonośników substancji przeciwnowotworowych, dr hab. Krzysztof Szczepanowicz**

Nanonośniki związków przeciwnowotworowych formowano metodą emulsyfikacji z odparowaniem rozpuszczalnika, a ich powierzchnię funkcjonalizowano techniką warstwa po warstwie. Miały one strukturę core@shell i rozmiar 100-200 nm. Metodologia umożliwiła enkapsulację leków przy użyciu biokompatybilnych składników. Opracowane nanonośniki zoptymalizowano pod pasywne dostarczanie leków do niszy nowotworowej, wykorzystując efekt EPR.

## **DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA INSTYTUTU**



## **Materiały i procesy katalityczne dla zrównoważonego rozwoju**



## 1. Badania doświadczalne i obliczeniowe nad wybranymi enzymami o potencjale aplikacyjnym

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

Dla enzymu tH6H przeprowadzono badania szybkiej kinetyki metodą rapid freeze quench dla kompleksu tH6H-Fe(II)- $\alpha$ KG-6OH-HYO otrzymanego w warunkach beztlenowych. Próbkę zamrożoną w określonych punktach czasowych zostały przeanalizowane metodą spektroskopii Mössbauera celem analizy przebiegu reakcji. Badania stopped-flow oraz rapid freeze quench wykonano dzięki współpracy z grupą prof. A. Osyczki (WBBiB UJ), natomiast pomiary spektroskopii Mössbauera wykonał prof. J. Korecki. Równolegle prowadzono badania krystalograficzne nad kompleksem tH6H-Ga(III)-SIN-6OH-HYO będącym analogiem produktu przejściowego reakcji. Otrzymano strukturę krystaliczną umożliwiającą analizę ułożenia substratu względem metalu w centrum aktywnym w mimikrze produktu przejściowego.

We współpracy ze Słowackim Uniwersytetem Technicznym w Bratysławie scharakteryzowano stabilność dehydrogenazy S-hydroksyfenyletanolowej z *A. aromaticum* (S-HPED) w funkcji pH i temperatury oraz wyznaczono profil stabilności termicznej dehydrogenazy ketosteroidowej (KSTD1) z *R. erythropolis*. Dla S-HPED na podstawie danych inaktywacyjnych z przedziału 25 - 60 °C zidentyfikowano w pH 9.0 jednoetapowy mechanizm inaktywacji termicznej („one step-two states”) oraz wyznaczono stałe szybkości inaktywacji w warunkach: i) z dodatkiem glukozy jako stabilizatora, ii) bez stabilizatorów. Wykonano testy aktywności S-HPED w reakcjach z 15 substratami. Dla 10 analizowanych związków potwierdzono aktywność enzymu i jego wysoką stereoselektywność.

Ponadto przeprowadzono w dziewięciu wariantach immobilizację dioksygenazy ekstradiolowej L-DOPY z *Beta vulgaris*; na nośnikach krzemionkowych i celulozowych funkcjonalizowanych grupami aminowymi, glicydylowymi i epoksydowymi oraz bez funkcjonalizacji. Do immobilizacji jako linkery zastosowano kwas askorbinowy, aldehyd glutarowy i diwinosulfon oraz zróżnicowane pH aktywacji grup funkcyjnych (6-11). Mimo osiągniętego 100% stopnia związania białka, 4-godzinne test aktywności immobilizatów dla każdego wariantu immobilizacji nie wykazały obecności produktu.

Przeprowadzono modelowanie struktur kompleksów enzym-substrat wybranych dehydrogenaz 3-ketosteroidowych (KstD) dla substratów i inhibitorów reakcji określając otoczenie aminokwasowe oraz wyznaczając energię interakcji enzym : substrat. Wyznaczono różnice strukturalne mogące odpowiadać za specyficzność substratową badanych KstD.

Dla modeli AlphaFold2 dwóch ludzkich białek z rodziny LY6 przeprowadzono wysokoprzepustowe dokowanie molekularne podzbioru około 5 milionów związków z bazy ZINC20. Wyniki dokowania pozwoliły na wybranie grupy kilkudziesięciu obiecujących związków, które zostaną przetestowane przez współpracowników z Uniformed Services University of the Health Sciences, Bethesda, MD, USA.

## **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, mgr. Katarzyna Zimowska, dr Wojciech Snoch)*

Projekt miał na celu opracowanie i charakterystykę naturalnych rozpuszczalników głęboko eutektycznych (NADES) jako ekologicznych alternatyw dla konwencjonalnych, toksycznych rozpuszczalników stosowanych w przemyśle. W ramach projektu przeprowadzono wieloetapowe badania obejmujące syntezę, charakterystykę oraz optymalizację NADES do zastosowań w procesach ekstrakcji biomasy zawierającej polihydroksyalkaniany (PHA).

W ramach badań zsyntetyzowano szereg NADES z różnymi składnikami, wykorzystując chlorek choline i mentol jako akceptory wiązań wodorowych (HBA) oraz donory, takie jak 1,2-propanodiol, mocznik, cukry i kwasy tłuszczowe, w tym te pochodzące z polimerów PHA. Szczególną uwagę poświęcono układom mentol-kwasy tłuszczowe, które charakteryzowały się stabilnością termiczną, niską lepkością oraz hydrofobowym charakterem. Analiza FTIR potwierdziła tworzenie wiązań wodorowych między składnikami, a badania DSC/TGA wykazały, że optymalne temperatury pracy wynoszą od 100 do 150°C dla większości NADES, co umożliwia ich zastosowanie w procesach ekstrakcji wymagających stabilności termicznej.

Przeprowadzone testy mieszalności wykazały, że NADES oparte na chlorku choline były mieszalne z wodą i metanolem, co klasyfikuje je jako rozpuszczalniki hydrofilowe. Natomiast systemy na bazie mentolu wykazały mieszalność z heksanem i chloroformem, co czyni je obiecującymi rozpuszczalnikami hydrofobowymi. Testy polarności oraz analiza z zastosowaniem czerwieni nilowej potwierdziły, że mentolowe NADES są odpowiednie do ekstrakcji hydrofobowych biopolimerów PHA. Wybrane NADES wykorzystano w procesach ekstrakcji biomasy bogatej w PHB i mcl-PHA, uzyskując wysoką wydajność i czystość polimerów, przy jednoczesnym ograniczeniu toksyczności procesu.

Najbardziej obiecujące wyniki uzyskano dla systemów NADES mentol-kwasy tłuszczowe, które pozwoliły na skuteczną izolację PHA z biomasy w warunkach łagodnych temperaturowo. Wybrane układy NADES charakteryzowały się niższą lepkością, co poprawiało przenoszenie masy i wydajność ekstrakcji. Badania potwierdziły, że zastosowanie NADES eliminuje konieczność użycia toksycznych rozpuszczalników, takich jak chloroform, jednocześnie pozwalając na łatwą regenerację rozpuszczalnika po procesie.

Wyniki badań wskazują na duży potencjał NADES jako zielonych, zrównoważonych rozpuszczalników do zastosowań przemysłowych. Ich biodegradowalność, nietoksyczność oraz możliwość dostosowania właściwości do specyficznych wymagań aplikacyjnych sprawiają, że stanowią one obiecującą alternatywę dla tradycyjnych rozpuszczalników. Systemy mentolowe, dzięki stabilności termicznej i hydrofobowemu charakterowi, otwierają nowe możliwości w przemyśle chemicznym i biotechnologicznym, szczególnie w obszarze ekstrakcji biomasy i produkcji biopolimerów.

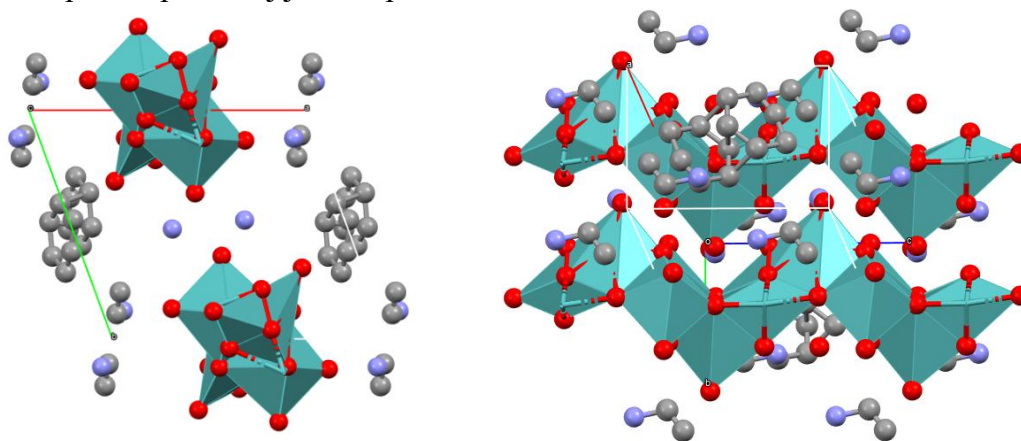
### 3. Nowe perokso- oraz poliokso- związki Mo(VI), W(VI) i V(V). Synteza, badania strukturalne i zastosowania w procesach utleniania

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

Celem badań była synteza nowych związków z grupy polioksometalanów, badanie ich własności fizykochemicznych, głównie struktur krystalicznych, trwałości termicznej badanej metodami xrpd vs.T (dyfraktometria proszkowa w funkcji temperatury), oraz badania katalityczne. Testowane reakcje katalityczne to reakcja utlenienia cyklooktanu oraz reakcja Baeyera-Villigera czyli utlenienia cykloheksanonu tlenem z powietrza w obecności aromatycznego aldehydu. Badania katalityczne uzupełniano badaniami powierzchni właściwej oraz stabilności cieplnej metodami DSC/TG.

Dużo uwagi poświęcono badaniom formowania wstępnego materiałów odnawialnych, w tym roku były to ligniny oraz ‘surowy’ materiał odnawialny, jakim są pestki winogron. ‘Surowy’ materiał poddawano procesowi suszenia, usuwania frakcji oleistych przy użyciu aparatu Soxhlet’a, kąpielom alkalicznym i finalnemu wyprażaniu w atmosferze azotu. Badano możliwość nasycania wnętrza prekursora węglowego materiałem typu POM’s. W tym roku był to trimolibdenian 3,5-dimetyloaniliny, wybrany z uwagi na łatwość i niezawodność syntezy w szerokim zakresie warunków (stężeń, czasu reakcji, pH roztworu). Testy powierzchni, badania mikroskopowe, analizy elementarne oraz próby detekcji frakcji POM’s w uzyskanych materiałach przebiegają pomyślnie, będą optymalizowane i kontynuowane.

Wiele badań preparatywnych przeprowadzano celem odtworzenia syntezy  $\gamma$ -oktamolibdenianu o-phenylenodiaminy, jednowodnego trimolibdenianu miedzi, oraz optymalizując metody syntez trimolibdenianów aniliny. Na uwagę zasługuje uzyskanie nowego trimolibdenianu anilinowo amonowego. Poniższy rysunek przedstawia rzuty struktury uzyskanej metodami xrpd, nie poddanej jeszcze procesowi udokładniania.



#### 4. Azotek boru jako katalizator i nośnik fazy aktywnej

*(dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN, prof. dr hab. Małgorzata Witko, dr hab. Renata Tokarz-Sobieraj, prof. IKiFP PAN, dr Erwin Lalik, mgr Jerzy Podobiński, dr hab. Anna Micek-Ilnicka, dr hab. Małgorzata Zimowska, dr Łukasz Kuterasiński, dr Mariusz Gackowski, dr inż. Katarzyna Samson, dr Małgorzata Ruggiero-Mikołajczyk, dr Agnieszka Drzewiecka, dr Robert Kosydar)*

W roku 2024 podjęto nowy temat badawczy, którego celem jest rozpoznanie reaktywności azotku boru (BN) jako katalizatora oraz nośnika fazy aktywnej w reakcjach selektywnego utleniania. Nasze zainteresowania podyktowane były wzrostem zainteresowania BN w katalizie, jaki obserwuje się w ostatnich latach.

Do badań wybrano preparat azotku boru produkcji Acros Organics. Następnie wyjściowy preparat aktywowano w plazmie, aby zmodyfikować jego właściwości powierzchniowe ( $\text{BN}_{\text{plasma}}$ ). Podstawowymi technikami fizykochemicznymi scharakteryzowano oba preparaty (XRD, SEM, niskotemperaturowa sorpcja azotu,  $^{11}\text{B}$  i  $^1\text{H}$  MAS NMR).

Stwierdzono, że na skutek aktywacji plazmą zmniejsza się powierzchnia właściwa wyjściowego BN (z  $42 \text{ m}^2/\text{g}$  do  $36 \text{ m}^2/\text{g}$ ). Zmianie ulega również dystrybucja porów określona przy użyciu metody NL-DFT: o ile w BN dominujące są pory o średnicy  $284 \text{ \AA}$  (pozostałe to  $179 \text{ \AA}$  i  $199 \text{ \AA}$ ), o tyle po modyfikacji w plazmie dominują te o średnicy  $199 \text{ \AA}$ .

Tak przygotowane preparaty wykorzystano jako katalizatory w reakcji utleniającego odwodornienia propanu (ODP) oraz nośniki fazy aktywnej tu: heteropolikwasów (HPA).

Testy ODP wykonywano w gazowym reaktorze przepływowym ze stałym złożem połączonym z chromatografem gazowym w celu detekcji substratów oraz produktów, wykorzystując  $0.5 \text{ mL}$  katalizatora zmieszanego z kwarcem w stosunku 1:1, w przepływie mieszaniny reakcyjnej  $60 \text{ mL}/\text{min}$ . W zakresie temperatur  $100\text{--}350^\circ\text{C}$  nie obserwowano zachodzenia reakcji, dlatego zdecydowano się zawęzić badanie reakcji do zakresu temperatur od  $400^\circ\text{C}$  do  $500^\circ\text{C}$ . Badane preparaty wykazują bardzo niskie konwersje propanu, preparat niemodyfikowany jest bardziej aktywny (w  $500^\circ\text{C}$   $C_{\text{BN}} = 2.8\% > C_{\text{BN}_{\text{plasma}}} = 1.4\%$ ). Wyjaśnieniem obserwacji może być zmniejszona powierzchnia właściwa  $\text{BN}_{\text{plasma}}$  w porównaniu do BN. Preparat  $\text{BN}_{\text{plasma}}$  wykazuje jednak zdecydowanie wyższą selektywność do propenu ( $S = 57\%$ ) niż niemodyfikowany BN ( $S = 39\%$ ).

BN i  $\text{BN}_{\text{plasma}}$  użyto również jako nośnik heteropolikwasów (HPA:  $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40} \times 28\text{H}_2\text{O}$  (HPW) i  $\text{H}_3\text{PMo}_{12}\text{O}_{40} \times 36\text{H}_2\text{O}$  (HPMo)). Syntezę katalizatorów HPA-BN o zawartości HPA wynoszącej 10% masowych prowadzono metodą impregnacji mokrej. HPA nanoszono na BN z roztworu etanolu w temperaturze pokojowej mieszając uzyskaną suspensję przez 2 h, a następnie próbki suszono w temperaturze  $50^\circ\text{C}$  przez 24 h. Otrzymane preparaty poddano testom katalitycznym w reakcji odwodnienia n-butanolu ( $\text{BuOH}$ ) w gazowym reaktorze przepływowym ze stałym złożem. Przed rozpoczęciem pomiarów katalizatory były aktywowane w temperaturze  $90^\circ\text{C}$  przez 30 min. w przepływie He. Pomiary prowadzono w zakresie temperatur  $90\text{--}230^\circ\text{C}$ , z detekcją reagentów on-line przy użyciu spektrometru gazowego z detektorem TCD.

Badane układy były aktywne w reakcji dehydratacji n-butanolu. Układy zawierające HPW wykazywały wyższe konwersje  $\text{BuOH}$  niż zawierające HPMo. Głównym produktem reakcji jest cis-2-buten, w którego tworzeniu chętniej biorą udział katalizatory zawierające HPW ( $Y_{\text{max}} = 75\%$ ) niż HPMo ( $Y_{\text{max}} = 23\%$ ). Katalizatory HPW-BN w zakresie temperatur  $90\text{--}230^\circ\text{C}$  były bardziej aktywne niż HPW- $\text{BN}_{\text{plasma}}$  (wykazywały wyższą konwersję  $\text{BuOH}$ ), natomiast preparaty HPMo-BN i HPMo- $\text{BN}_{\text{plasma}}$  wykazywały zbliżoną aktywność w całym zakresie badanych temperatur.

## **Fizykochemia powierzchni i nanostruktur materii miękkiej**



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

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

Fluorescencyjne nanoklastry metali (Me NCs), składające się z kilku do kilkudziesięciu atomów metalu i syntezowane na matrycy białek, wykazują właściwości molekularne dyskretnych stanów elektronowych, doskonałą fotostabilność, wysokie wskaźniki emisji oraz niską toksyczność w porównaniu do odpowiedników w postaci nanocząstek. Mimo szeroko rozwiniętych badań nad zastosowaniem nanoklastrów jako sond fluorescencyjnych, w literaturze brakuje danych dotyczących mechanizmów ich immobilizacji na powierzchniach międzyfazowych. Zakłada się, że wytwarzanie fluorescencyjnych warstw nanoklastrów na powierzchniach nośników koloidalnych może znacząco poszerzyć ich spektrum aplikacyjne. Celem badań było więc określenie i opisanie procesów osadzania fluorescencyjnych nanoklastrów metali na powierzchniach nośników koloidalnych, takich jak cząstki krzemionki i polistyrenu.

W sprawozdawanym okresie, badania zostały ukierunkowane m.in. na optymalizację metod otrzymywania stabilnych hydrozoli nanoklastrów srebra i miedzi na matrycach lizozymu (LIZ) oraz albuminy ludzkiej (HSA) i wołowej (BSA). Ponadto, uwagę skupiono na wyznaczeniu właściwości luminescencyjnych nanoklastrów złota otrzymywanych na matrycach ww. białek oraz kontynuowano prace w zakresie badania mechanizmów osadzania nanoklastrów złota na powierzchniach nośników koloidalnych.

W toku przeprowadzonych badań udało się otrzymać stabilne hydrozole następujących nanoklastrów HSA-Ag NCs, HSA-Cu NCs, BSA-Ag NCs, BSA-Cu NCs, LIZ-Ag NCs, LIZ-Cu NCs. Charakterystyka fizykochemiczna HSA-Ag NCs oraz HSA-Cu NCs przeprowadzona z użyciem techniki dynamicznego oraz elektroforetycznego rozpraszania światła w kontrolowanych warunkach pH, siły jonowej oraz temperatury wykazała, że oba typy nanoklastrów posiadają zbliżony zakres stabilności oraz porównywalne właściwości elektrokinetyczne, które bardzo dobrze korelowały również z właściwościami HSA-Au NCs. Wszystkie typy nanoklastrów były stabilne w zakresie  $4.0 < \text{pH} < 5.8$  (dla siły jonowej nie wyższej od 0.15 M) oraz posiadały punkt izoelektryczny w pH 4.5.

Wyniki badań spektroskopowych przeprowadzone dla nanoklastrów złota na matrycach HSA, BSA oraz LIZ wykazały, że średnie czasy życia fluorescencji oraz wydajność kwantowa ich fluorescencji silnie zależą od pH, siły jonowej i typu białka. Dla przykładu, dla siły jonowej 0.001 M, BSA-Au NCs wykazywały średni czas życia fluorescencji 200 ns oraz 90 ns dla pH 3.5 oraz 9.0 podczas gdy dla LIZ-Au NCs wyznaczono 120 ns oraz 50 ns dla pH 3.5 oraz 9.0. Wydajność kwantowa fluorescencji wahała się w zakresie 5-9%. Najwyższą wartość wykazywały klastry LIZ-Au NCs w punkcie izoelektrycznym. Przeprowadzono również badania z użyciem spektroskopii dichroizmu kołowego (CD), które pozwoliły zidentyfikować udział poszczególnych struktur białek w otrzymanych nanoklastrach złota.

W ramach dalszych badań przystąpiono do opracowania metody preparatyki warstw LIZ-Au NCs na powierzchni koloidalnej krzemionki o średniej wielkości  $800 \pm 12$  nm. W tym celu przeprowadzono charakterystykę fizykochemiczną krzemionki zdyspergowanej w roztworach elektrolitów. Wyznaczono zależności ruchliwości elektroforetycznej oraz promienia hydrodynamicznego w funkcji pH i siły jonowej. Wykonano również obrazowanie SEM. Na tak scharakteryzowanej krzemionce wytwarzano warstewki LIZ-Au NCs określając zależność potencjału zeta krzemionki w funkcji stężenia nanoklastrów ( $1-5 \text{ mgL}^{-1}$ ). Pomiaru przeprowadzono dla trzech wartości siły jonowej (0.001, 0.01, 0.15 M NaCl). Za pomocą obrazowania z użyciem mikroskopii konfokalnej oraz pomiarów spektrofotometrycznych wykazano, że osadzone monowarstwy nanoklastrów zachowały właściwości fluorescencyjne. W ten sposób potwierdzono otrzymanie fluorescencyjnych cząstek koloidalnych o rozmiarach znacznie większych niż rozmiary niezwiązanych LIZ-Au NCs.

## **6. Właściwości fizykochemiczne i mechaniczne układów „bio”**

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

Przeprowadzono szczegółowe modelowanie stanów pośrednich w procesie agregacji białka lizozymu pod wpływem czynnika indukującego agregację, jakim jest heparyna, w warunkach odpowiadających środowisku natywnemu. Analiza obejmowała identyfikację kluczowych etapów procesu agregacji, w tym inicjację, formowanie jąder agregacyjnych oraz przygotowano metodologię badania wzrostu większych struktur białkowych. W ramach badań opracowano kompleksową metodologię umożliwiającą precyzyjne określanie parametrów procesowych, takich jak energia oddziaływań międzycząsteczkowych, dynamika tworzenia wiązań oraz zmiany konformacyjne białek, na podstawie wyników uzyskanych z symulacji dynamiki molekularnej. Modelowanie umożliwiło również identyfikację kluczowych reszt aminokwasowych biorących udział w procesie agregacji oraz ocenę wpływu heparyny na stabilizację stanów pośrednich. Wyniki te mogą stanowić podstawę do dalszych badań nad mechanizmami molekularnymi agregacji białek oraz projektowaniem strategii zapobiegania procesom patologicznej agregacji.

## 7. 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 hab. inż. Ewa Młynczak, dr Robert Socha, dr inż. Dorota Wilgocka-Słęczak, mgr Bohdana Blyzniuk, mgr Natalia Kwiątek)*

Badania adsorpcji i morfologii powierzchni cienkich warstw organicznych osadzanych na Ag(100) przeprowadzono we współpracy z Uniwersytetem Wrocławskim oraz Instytutem Fizyki Doświadczalnej Uniwersytetu Johannesesa Keplera w Linzu. Zbadano właściwości strukturalne warstw ftalocyjaniny kobaltu (CoPc), fluorowanej ftalocyjaniny miedzi (F16CuPc) oraz warstw bimolekularnych (złożonych z CoPc i F16CuPc) adsorbowanych na powierzchni Ag(100) w temperaturze pokojowej, a następnie wygrzewanych w 470 K. Pokrycie CoPc do poziomu monowarstwy (ML) zmniejsza pracę wyjścia powierzchni srebra, podczas gdy F16CuPc ją zwiększa. Ze względu na elektrostatyczne oddziaływanie pomiędzy ujemnie naładowanym fluorem w F16CuPc i dodatnio naładowanym wodorem w CoPc, pierwsza monowarstwa fazy mieszanej w stosunku 1:1 porządkuje się w nadstrukturę przypominającą szachownicę. Zaobserwowano powstawanie domen o przeciwnej chiralności, co jest związane ze specyficzną adsorpcją molekuł na powierzchni Ag(100). Pokazano, że zastosowanie trybu  $\mu$ LEED mikroskopu LEEM do rozcieńczonego 2D gazu molekularnego utworzonego przez około 0,5 ML F16CuPc na powierzchni Ag(100) umożliwia bezpośrednie obrazowanie czynnika struktury molekularnej, a tym samym identyfikację geometrii adsorpcji cząsteczki.

Kontynuowano 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 skaningowego mikroskopu tunelowego (STM). Sn nanoszono na Pt(111) w temperaturze 27°C. Analizowano morfologię i uporządkowanie warstw dla nadstruktur  $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$  i  $c(4\times 2)$ , odpowiadających pokryciu 0,33 ML i 0,5 ML, które zidentyfikowano we wcześniej przeprowadzonych badaniach za pomocą mikroskopii na niskoenergetycznych elektronach (LEEM). Badania wykonano również dla pokryw pośrednich, dla których nadstruktury nie są w pełni wykształcone lub stanowią mieszaninę nadstruktur. Stwierdzono niestabilność czasową warstw Sn zależną od pokrycia, która najbardziej widoczna była dla pokrycia około 0.5 ML, dla którego zaobserwowano tworzenie się z czasem obszarów z rekonstrukcją  $(\sqrt{7}\times\sqrt{7})R19.1^\circ$ .

Kontynuowano badania układów spintronicznych opartych na tlenkach metali 3d. Dla układów epitaksjalnych Co/magnetyt/Pt/MgO(111) oraz Co/hematyt/Pt/MgO(111) analizowano pomiary zrealizowane w roku wcześniejszym przy wykorzystaniu mikroskopu PEEM na linii DEMETER oraz na stacji XAS na linii PIRX w Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego Solaris. Przeprowadzono analizę stanu chemicznego w obszarze kontaktu warstwy Co z warstwami tlenków żelaza oraz korelacji pomiędzy strukturami magnetycznymi podwarstw.

## 8. Modelowanie komputerowe wytwarzania zdegradowanych powierzchni plastików przy użyciu reaktywnej dynamiki molekularnej

(prof. dr hab. Tomasz Pańczyk, dr Paweł Wolski)

Odpady plastikowe stwarzają coraz poważniejsze zagrożenie dla środowiska, zwłaszcza dla organizmów morskich. W wyniku oddziaływania promieniowania ultrafioletowego i sił mechanicznych odpady plastikowe ulegają znacznym przemianom chemicznym oraz fragmentacji, co prowadzi do powstawania mikro i nanocząstek, określanych jako mikro i nanoplastik. Powierzchnie tych cząstek różnią się znacznie pod względem składu chemicznego od powierzchni materiałów wyjściowych, co stanowi zagrożenie dla organizmów żywych, w tym ludzi. Dlatego celem przeprowadzanych badań było teoretyczne przewidywanie chemii powierzchni nanocząstek uzyskanych z materiałów plastikowych, głównie polietylenu, politereftalanu etylu, polistyrenu i polipropylenu. Ze względu na konieczność analizy reakcji chemicznych oraz ich produktów konieczne było zastosowanie reaktywnych pól siłowych oraz technik umożliwiających aktywację reakcji chemicznych. Zastosowano w tym celu pole siłowe ReaxFF oraz mechaniczne przecinanie materiału i jego kompresję szokową.

Uzyskane wyniki umożliwiły opracowanie nowatorskiej metodyki wytwarzania modeli zdegradowanych powierzchni materiałów plastikowych będących wynikiem oddziaływania sił mechanicznych oraz aktywacji reakcji w materiale na skutek promieniowania UV.

Przy użyciu opracowanej metodyki badaniom poddano procesy degradacji politereftalanu etylenu (PET). W symulacjach wykorzystano reaktywne pole siłowe ReaxFF zaprojektowane dla układów CHO (węgiel-wodór-tlen) w gałęzi "combustion". Próbkę PET zostały poddane mechanicznemu rozcinaniu w celu wytworzenia powierzchni PET. Te powierzchnie zostały dalej zbadane w celu oceny ich składu chemicznego oraz ilości i typów grup funkcyjnych na nich utworzonych. Na tych powierzchniach zidentyfikowano najwięcej wolnych rodników benzenowych i resztek dioxolanu. Ponadto próbki zostały poddane kompresji szokowej w celu wywołania bardziej rozległych przemian chemicznych, przypominających naturalnie degradowane nanoplastiki. Doprowadziło to do odkrycia różnych połączeń wewnątrz objętości materiału, z których wiele pojawiło się jako nowe połączenia chemiczne lub wolne rodniki na powierzchniach. Istotnym wnioskiem jest obserwacja znacznego wydzielania dwutlenku węgla zarówno podczas mechanicznej fragmentacji, jak i kompresji szokowej próbek PET. Ważnym wnioskiem jest również to, że chemicznie zdegradowane powierzchnie PET znacząco różnią się od oryginalnego materiału.

Analogiczne badania polipropylenu (PP) oraz polistyrenu (PS) doprowadziły do wniosku, że mechaniczne przecinanie tych materiałów prowadzi do uzyskania powierzchni zawierających produkty mechanochemicznego rozrywania wiązań. Zaobserwowano, że oba polimery pękają w obrębie głównego łańcucha generując rodniki  $-CH_2\cdot$  oraz  $-CH\cdot$ . Średnie gęstości powierzchniowe tych drobin oszacowano na  $0.0415 \text{ \AA}^{-2}$  dla PS oraz  $0.0289 \text{ \AA}^{-2}$  dla PP. Zaobserwowano również niewielką produkcję lekkich węglowodorów: cyclopropylobenzenu oraz propenu.

Kompresja szokowa zastosowana do próbki PS doprowadziła do wniosku, że główną reakcją degradacji tego materiału jest fuzja dwóch pierścieni benzenowych prowadząca do częściowej ich dearomatyzacji. Reakcja ta była powielana prowadząc do uzyskania wielokrotnych połączeń tego typu w formie klasterów i łańcuchów a w bardziej drastycznych warunkach również struktur 3D tego typu. Znacznie mniej prawdopodobnym schematem było łączenie pierścienia benzenowego z alifatycznym atomem węgla w głównym łańcuchu.

Uzyskane wyniki pozwoliły na lepsze zrozumienie możliwych ścieżek degradacji kilku najbardziej popularnych materiałów plastikowych. Otworzyły też możliwości analizy i oceny produktów degradacji innych materiałów.

## 9. Cząsteczki sacharydów pod wpływem zewnętrznych sił mechanicznych: obliczenia teoretyczne

*(prof. dr hab. Wojciech Płaziński, dr Agnieszka Brzyska, mgr Valery Lutsyk)*

W pierwszej części badań rozważano mechanizm zmian konformacyjnych w mono-, di- i oligomerach budujących łańcuchy naturalnych polisacharydów, alginianów, jakie zachodzą pod wpływem zewnętrznych, rozciągających sił mechanicznych. Przejścia tego typu mają miejsce w przypadku eksperymentów AFM, a zrozumienie zależności obserwowanych (zależność siła vs. rozciągnięcie łańcucha) od typu badanego polisacharydu może stanowić narzędzie do analizy ilościowej składu łańcucha w przypadku homopolisacharydów, jak również do eksploracji słabiej poznanych konformacyjnych stopni swobody (np. zmiany konformacji pierścieni piranozowych). W badaniach wykorzystano zaawansowane metody teoretyczne, w tym metodologię mechaniki kwantowej (m.in. metoda EGO oraz symulacje dynamiki molekularnej w hybrydowych potencjałach QM/MM). W wyniku badań stwierdzono silną zależność profili siła vs. rozciągnięcie od rodzaju rozpatrywanej jednostki cukrowej (mannuronianu lub guluronu), co ma związek z topologią wiązań glikozydowych przylegających do danego monomeru. Bardziej skomplikowany charakter profilu energetycznego rozciągania monomeru guluronianu związany jest z występowaniem szeregu procesów dystorsji pierścienia, nieobecnych w przypadku mannuronianu. Co więcej, w przypadku łańcuchów o heterogenicznym składzie, przebieg takich profili rozciągania jest zależny od stosunku zawartości jednostek mannuronowych do guluronowych, co w przyszłości może umożliwić analizę ilościową składu łańcucha na podstawie danych AFM. Wyniki opublikowano w pracy [10.1016/j.carres.2024.109294].

W drugiej części badań zajęto się problemem odtwarzania danych spektroskopowych NMR (głównie przesunięć chemicznych) dla szeregu monosacharydów, za pomocą metody opracowanej wcześniej w naszym zespole: [10.1039/C7CP02920A]. Stosując kombinację klasycznych symulacji metodą dynamiki molekularnej oraz optymalizacji metodami kwantowomechanicznymi dla racjonalnie wybranej podgrupy konfiguracji molekularnych, uzyskano bardzo dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi dla grupy jedenastu monosacharydów. Ponadto stwierdzono, że możliwe jest wyprowadzenie empirycznych zależności pomiędzy przesunięciami chemicznymi atomów budujących rotujące podstawniki monosacharydów (np. grupy hydroksymetylowej aldoheksopiranozy) a konformacją takich podstawek, w analogii do równania Karplusa. Umożliwiło to oszacowanie populacji rotamerów grupy hydroksymetylowej w oparciu wyłącznie o wartości przesunięć chemicznych dla atomów C6, H6R i H6S. To odkrycie otwiera nowe możliwości dla wykorzystania zbioru wartości przesunięć chemicznych jako danych opisujących nie tylko strukturę chemiczną, ale także dynamiczne zmiany konformacji cząsteczek sacharydów.

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

*(dr hab. Paweł Weroński prof. IKiFP PAN)*

Miki stanowią grupę glinokrzemianów o niezwykłych właściwościach i licznych zastosowaniach. W badaniach naukowych minerał ten jest wykorzystywany m.in. ze względu na jego doskonałą łupliwość, co pozwala na uzyskanie w prosty sposób atomowo gładkich powierzchni. Ta właściwość sprawia, że miki są często stosowane jako modelowe substraty do badania procesów adsorpcji cząstek koloidalnych na granicy ciecz / ciało stałe. Jednym z najważniejszych parametrów determinujących te procesy jest potencjał elektryczny powierzchni miki, przybliżany zwykle przez potencjał zeta. Zależy on od pH roztworu, z którego osadzane są cząstki, jego składu i siły jonowej. Zależność potencjału powierzchni od rodzaju użytych jonów pozwala na kontrolowanie tego potencjału, przy ustalonej wartości pH i siły jonowej, poprzez użycie mieszanin różnych elektrolitów. Dotychczas metoda ta nie była szeroko stosowana ze względu na brak opisu teoretycznego zależności potencjału zeta miki od składu elektrolitu.

W ramach wykonanych badań opracowaliśmy uogólniony model teoretyczny opisujący ilościowo zależność potencjału zeta miki od składu mieszaniny dwóch jednowartościowych elektrolitów. W naszych badaniach wykorzystaliśmy klasyczne przybliżenie Gouy-Chapman-Stern-Grahame (GCSG) podwójnej warstwy elektrycznej, rozwinięte wcześniej do opisu potencjału zeta miki w elektrolitach jednoskładnikowych. Model ten rozszerzyliśmy na mieszaniny zawierające dwa kationy jednowartościowe, zaniebując przy tym różnicę między ich promieniami jonowymi. Takie podejście jest równoważne z włączeniem do modelu teoretycznego specyficznych właściwości jonów wyłącznie poprzez stałe równowagi reakcji ich wymiany z protonami obecnymi na powierzchni miki. Stałe te, podobnie jak stałą adsorpcji protonów, wyznaczyliśmy z eksperymentów wykonanych na układach jednoskładnikowych za pomocą klasycznego modelu GCSG. Otrzymane parametry wykorzystaliśmy następnie do modelowania układów dwuskładnikowych złożonych z elektrolitów KCl i NaCl o łącznym stężeniu  $0.1 \text{ mol/dm}^3$ . W tym celu opracowaliśmy algorytm obliczeń numerycznych pozwalający na wyznaczenie potencjału zeta miki w elektrolitach o różnym składzie. Następnie wykonaliśmy szereg obliczeń dla badanych układów. Wyniki teoretyczne porównaliśmy z wynikami eksperymentalnymi.

Przeprowadzone badania pozwoliły ocenić przydatność opracowanego modelu i granice jego stosowalności. Przewidywania teoretyczne okazały się jakościowo zgodne z wynikami eksperymentalnymi. Wartości obliczone obarczone były jednak znacznymi błędami w stosunku do wartości zmierzonych, sięgającymi kilkadziesiąt procent. W szczególności okazało się, że uogólniony model GCSG umożliwia poprawny opis potencjału zeta miki w elektrolitach o niezbyt dużych stężeniach, optymalnie do  $0.01 \text{ mol/dm}^3$ . Jest to konsekwencja ograniczeń równania Poissona-Boltzmanna, opartego na założeniu równości potencjału średniej siły i potencjału średniego jonu w elektrolicie, spełnionym tylko w rozcieńczonych elektrolitach. W związku z tym zaplanowane zostały dalsze badania eksperymentalne i teoretyczne z wykorzystaniem mieszanin elektrolitów o niższych stężeniach.

## 11. Teranostyczne nanocząstki substancji przeciwnowotworowych

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

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 2024 roku skupiliśmy się na opracowaniu teranostycznych nanonośników dla celowanej terapii przeciwnowotworowej. Teranostyczne nanonośniki związków przeciwnowotworowych formowano metodą emulsyfikacji połączonej z odparowaniem rozpuszczalnika. Następnie otrzymane nanonośniki sfunkcjonalizowano metodą sekwencyjnej adsorpcji naładowanych nanoobjektów, zwaną metodą warstwa po warstwie. Wytwarzane nanonośniki charakteryzowały się budową core@shell. Wybrane leki przeciwnowotworowe np. staurosporyna, salinomycyna czy docetaxel enkapsulowano w wytwarzanych nanonośnikach. Do budowy nanonośników użyto biokompatybilne składniki np. poliaminokwasy poli(L-Lizynę), poli(L-Lizynę) znaczoną rodaminą, czy poli(kwasu glutaminowego). Rozmiar otrzymanych nanonośników mieścił się w zakresie 100-200 nm. Właściwości opracowanych nanonośników zostały zoptymalizowane pod pasywne dostarczanie leków do niszy nowotworowej, bazując na efekcie EPR.

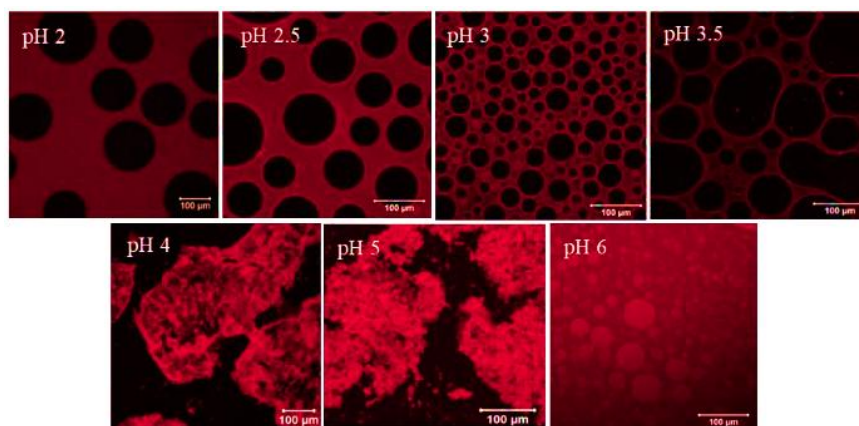
W kolejnych etapach badań określona zostanie efektywność działania enkapsulowanych substancji przeciwnowotworowych na wybranych liniach komórkowych. Ponadto, przebadamy możliwość obrazowania otrzymanych nanonośników za pomocą metod obrazowania optycznego (OI).

## 12. Kinetyka koalescencji w emulsjach wodno-wodnych

(prof. dr hab. Jan Zawala, dr inż. Andrzej Baliś, dr Dominik Kosior, dr hab. Georgi Gochev, dr inż. Agata Wiertel-Pochopień, 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 kapsulek 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 wykorzystując pojedynczy układ ATPS, składający się z roztworów wodnych glikolu polietylenowego (PEG) o masie cząsteczkowej 10 kDa (7.9 % wag.) i dekstranu (DEX) o masie cząsteczkowej 75 kDa (7.9 % wag.) z dodatkiem nano-cząstek mikro-żelowych otrzymanych z  $\beta$ -lactoglobuliny (BLG) o różnych rozmiarach. Na bazie tych substancji otrzymano przejściowe emulsje typu PEG-w-DEX stabilizowane cząstkami BLG oraz zbadano szybkość separacji faz (rozpadu emulsji). Zbadano wpływ pH (w zakresie 2 - 6) na stabilność emulsji dla cząstek o stałym rozmiarze (64 nm). Najstabilniejszą emulsję uzyskano przy pH = 3. Następnie przeprowadzono eksperymenty z emulsjami przy pH = 3 dla cząstek BLG o stężeniu 0.1 % wag. i różnych rozmiarach (od 40 do 190 nm). Wykazano, że maksymalną stabilność emulsji (rzędu godziny) osiągnięto przy zastosowaniu cząstek BLG o rozmiarach pośrednich (70 - 80 nm). Wykazano, że stabilność układu ATPS stabilizowanego cząstkami BLG ściśle zależy od rozmiaru tych cząstek oraz warunków pH tworzenia emulsji. Emulsje o największej stabilności otrzymano w pH = 3 (patrz rys. 1) oraz przy wielkości cząstek 80 nm. W takich warunkach cząstki BLG preferencyjnie akumulują się w obszarze międzyfazowym (pomiędzy dwiema fazami wodnymi), co przeciwdziała koalescencji kropeł. W szerszym ujęciu generalizacja tej korelacji wymaga zbadania różnych systemów ATPS oraz cząstek o różnych właściwościach powierzchniowych.

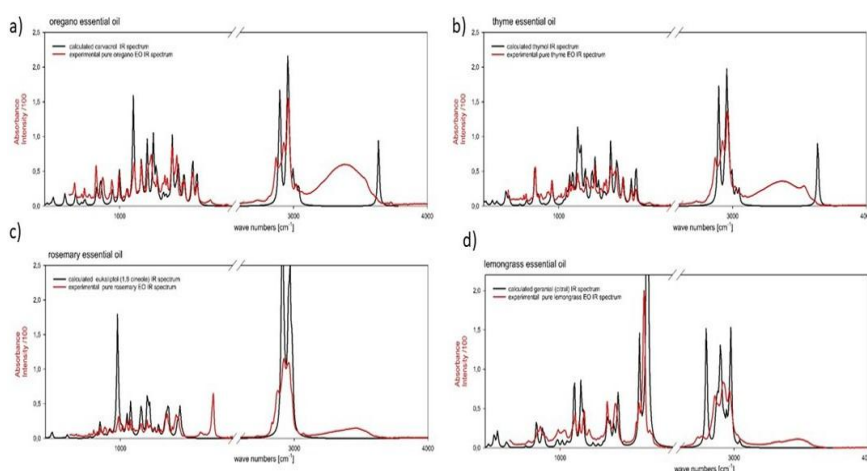


Rys. 1. Reprezentatywne zdjęcia uzyskane za pomocą konfokalnej laserowej mikroskopii skaningowej dla emulsji typu PEG-w-DEX/cząstki BLG (średnica 64 nm, 0,2 % wag. BLG) przy różnych wartościach pH. Przy pH = 3 stopień dyspersji był największy – widać akumulację cząstek BG w obszarze międzyfazowym (na obrzeżasz kropeł).

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

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

W ramach zadania statutowego, badano właściwości emulsji: wodne roztwory polisacharydów (chitosan-polikation oraz furcelleran-polianion) z roślinnymi olejkami eterycznymi (z oregano, tymianku, rozmarynu oraz trawy cytrynowej). Badania wykazały, że polisacharydy poprzez adsorpcję na granicy faz mogą przyczyniać się do elektrostatycznej stabilizacji emulsji, a także dzięki zwiększonej w ich obecności lepkości roztworu przeciwdziałać koalescencji. Pogłębiona analiza widm IR z wykorzystaniem metod DFT pozwalających na obliczenie teoretycznych widm dla głównych składników komercyjnych olejków, potwierdziła iż są to odpowiednio karwakrol dla oregano, tymol dla tymianku, 1,8- cyneol dla rozmarynu i citral dla olejku z trawy cytrynowej. W przypadku karwakrolu i tymolu możemy zauważyć w widmach obliczeniowych ostre pasmo  $\sim 3630\text{ cm}^{-1}$  (rys. 1a. i 1b.), ponieważ obliczenia przeprowadzono dla izolowanych cząsteczek. Wolne grupy hydroksylowe występują tylko w fazie gazowej lub w bardzo rozcieńczonych roztworach w niepolarnych rozpuszczalnikach dlatego w widmach eksperymentalnych olejków z oregano i tymianku obserwujemy silne, szerokie pasmo w zakresie  $3600\text{--}3100\text{ cm}^{-1}$  wynikające z obecności grup OH zaangażowanych w międzycząsteczkowe wiązania wodorowe. W przypadku olejku z trawy cytrynowej i rozmarynu, słabe pasma w tym regionie nie wykluczają obecności grup OH. W pozostałych przypadkach widma eksperymentalne są dobrze odwzorowane przez widma obliczeniowe. Pojawienie się pasm w obszarze  $1700\text{--}1740\text{ cm}^{-1}$  może sugerować obecność niektórych kwasów organicznych w olejkach eterycznych, mogących oddziaływać elektrostatycznie z polikationem jakim jest chitosan. Przygotowano publikację „Nanoformulation of natural essential oils, bio-polysaccharides (fucellaran, chitosan) and antimicrobial peptides (RW4, LL37) for application in the food industry – formation, stability and properties”. Ponadto badano stabilność złożonych emulsji zawierających polisacharydy i średniołańcuchowe triglicerydy (MCT) jako fazę olejową.



Rys.1 Porównanie widm IR eksperymentalnych dla czystych komercyjnych olejków eterycznych z teoretycznymi obliczonymi metodami DFT dla ich głównych składników a) Karwakrolu dla olejku z oregano, b) tymolu dla olejku z tymianku, c) 1,8- cyneolu dla olejku z rozmarynu, d) citralu dla olejku z trawy cytrynowej.

## **14. Wpływ silnego odkształcenia Mg na właściwości warstw fosforanowych**

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

Celem prac prowadzonych w 2024 roku było kontynuowanie badań rozpoczętych w 2023 roku nad wpływem intensywnej deformacji plastycznej stopów Mg na właściwości fizykochemiczne warstw konwersyjnych osadzanych na tych stopach. Analizowano wpływ zastosowanej obróbki mechanicznej na mikrostrukturę badanych stopów. Badania te skorelowano z elektrochemicznymi badaniami korozyjnymi stopów Mg pokrytych fosforanowymi warstwami konwersyjnymi.

Proces deformacji przeprowadzono za pomocą mechanicznej obróbki powierzchniowej ścierniej (SMAT) z użyciem różnych parametrów dla stopów Mg z serii AZ, aby uzyskać struktury powierzchniowe o różnych morfologiach, które następnie scharakteryzowano przy użyciu dostępnych metod fizykochemicznych. Wykorzystano elektronową mikroskopię skaningową, dyfrakcję rentgenowską, spektroskopię fotoelektronów rentgenowskich oraz spektroskopię w podczerwieni. Właściwości ochronne uzyskanych materiałów badano metodami polaryzacji potencjodynamicznej oraz testami zanurzeniowymi w roztworach NaCl.

Badano wpływ intensywnej deformacji na właściwości stopów magnezu AZ31 i AZ91-T6. Elektrochemiczne badania stopów przeprowadzono w roztworach NaCl. Na powierzchniach przygotowanych w ten sposób osadzano warstwy konwersyjne z kąpeli fosforanowych. Wykonano długoterminowe testy wydzielania wodoru w roztworach NaCl dla stopów przed i po obróbce SMAT. Testy wydzielania wodoru wykazały, że próbki poddane deformacji wykazywały mniejsze wydzielanie wodoru w porównaniu do próbek referencyjnych.

Zastosowanie SMAT wpływa na zachowanie korozyjne badanych stopów magnezu, czyniąc je bardziej reaktywnymi we wczesnych etapach ekspozycji na środowiska korozyjne, co z kolei przyspiesza formowanie gęstej warstwy produktów korozji na powierzchni podczas zanurzenia w roztworach NaCl. To z kolei prowadzi do poprawy odporności korozyjnej w początkowych godzinach zanurzenia. Zastosowanie metody SMAT wpływa na jakość osadzanych warstw konwersyjnych.

## 15. Molekularne aspekty stabilności konformacyjnej białek w kontekście tworzenia superstruktur amyloidowych

(prof. dr hab. inż. Barbara Jachimska, dr inż. Agnieszka Kamińska, mgr inż. Magdalena Goncerz, mgr Kamil Rakowski, mgr inż. Łukasz Luśtyk)

Badanie stabilności konformacyjnej warstw białkowych na granicy faz ciało stałe-ciecz jest kluczowe dla utrzymania aktywności biologicznej białka i zrozumienia interakcji zaadsorbowanych białek z błonami lipidowymi. Zmiany w strukturze białka mogą prowadzić do rozwoju wielu chorób, w tym chorób neurodegeneracyjnych. Głównym celem tych badań była analiza strukturalna lizozymu zaadsorbowanego na powierzchni złota oraz błony lipidowej w zmiennych warunkach środowiskowych. Właściwości fizykochemiczne lizozymu, takie jak wielkość i potencjał zeta, mierzono przy użyciu metody DLS. Mikrowagę kwarcową z rozpraszaniem energii (QCM-D), wieloparametrowy rezonans plazmonów powierzchniowych (MP-SPR) i spektroskopię w podczerwieni z transformacją Fouriera (FT-IR) zastosowano do określenia wydajności adsorpcji lizozymu i hydratacji warstwy lizozymu utworzonej na granicy faz. Strukturę drugorzędową lizozymu analizowano przy użyciu dichroizmu kołowego (CD). Ponadto widma FT-IR amidu I wykorzystano do monitorowania stabilności strukturalnej na powierzchni adsorpcyjnej. Przeprowadzono badania XPS dla lizozymu zaadsorbowanego na powierzchni złota oraz membranie lipidowej.

Badania MP-SPR i QCM-D wykazały, że podczas tworzenia monowarstwy na powierzchni złota orientacja cząsteczek zmienia się wraz ze wzrostem pokrycia powierzchniowego. Wyższy poziom hydratacji zaadsorbowanej warstwy białkowej (78-90%) uzyskano dla lizozymu zaadsorbowanego przy pH 4,0 w porównaniu do pH 7,5 (58-72%). Stabilność strukturalną lizozymu na powierzchni kontrolowano poprzez dekonwolucję pasma Amide I, które odpowiada na zmiany konformacyjne w obrębie struktury białka. Stwierdzono odmienne zmiany w strukturze drugorzędowej lizozymu na powierzchni złota i membrany lipidowej. Na powierzchni złota obserwuje się występowanie antyrównoległych  $\beta$ -arkuszy, które mogą wskazywać na początek procesu nieprawidłowego fałdowania białka i jego destabilizację. Adsorpcja lizozymu na powierzchni błony lipidowej prowadzi do zwiększenia zawartości struktur nieuporządkowanych.

Wyznaczone stałe szybkości kinetycznej ( $k_a$ ,  $k_d$ ) i stałe dysocjacji równowagowej, wskazujące na większe powinowactwo lizozymu do powierzchni złota dla niskich wartości pH (4.0). Z kolei adsorpcja lizozymu na powierzchni membrany lipidowej jest mniej wrażliwa na różnice pH środowiska, a efektywność adsorpcji jest na podobnym poziomie. Na podstawie otrzymanych wartości stałej KD, powinowactwo cząsteczek lizozymu do powierzchni membrany było wyższe niż powinowactwo do powierzchni złota niezależnie od warunków środowiskowych. Na podstawie powyższych badań można stwierdzić, iż w przypadku membrany lipidowej uwidacznia wkład oddziaływań hydrofobowych na stabilność warstw białka.



## **Fizykochemia w ochronie dziedzictwa kultury**



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

*(prof. dr. hab. Łukasz Bratasz, dr Marcin Strojcki, Nefeli Avgerou, dr Sergii Antropov)*

Monitorowane obiekty miały różną wielkość, strukturę budowlaną, strategię i systemy grzewcze oraz liturgie, gdyż badania objęły obok kościołów rzymskokatolickich cerkwie prawosławne. W każdym obiekcie system pomiarowy składał się z przynajmniej dwóch mierników stężenia pyłu w dwóch frakcjach wielkości cząstek – drobnej ( $0,3 - 1 \mu\text{m}$ ) oraz grubej (powyżej  $1 \mu\text{m}$ ). Mierniki były rozmieszczone w różnych lokalizacjach w profilu pionowym obok czujników temperatury i wilgotności względnej powietrza, czujnika prędkości i kierunku ruchu powietrza oraz czujnika stężenia dwutlenku węgla.

Zgromadzone dane uwzględniające znaczną zmienność stężenia pyłu na zewnątrz oraz różny sposób użytkowania poszczególnych budynków posłużył do wyznaczenia parametrów charakteryzujących monitorowane wnętrza takie jak współczynnik wymiany powietrza (AER), penetracji (P) oraz szybkości depozycji pyłu (k). W wyniku przeprowadzonej analizy ustalono że:

- wartość AER zmienia się w szerokich granicach między 0,08 na godz. (duży średniowieczny kościół murowany z małymi oknami) do 1,2 na godz. (niewielka drewniana cerkiew o stosunkowo otwartej strukturze).
- wartości P przyjmują niekorzystne, bo wysokie, wartości między 0,7 a 0,9 dla cząstek o średnicy między  $0,3$  do  $1 \mu\text{m}$  (frakcja drobna) oraz od 0,16 do 0,75 dla cząstek o średnicy powyżej  $1 \mu\text{m}$  (frakcja gruba).

Wyznaczone wartości k posłużyły do obliczenia kluczowego parametru wpływającego na narastanie zabrudzenia jakim jest szybkość osiadania cząstek na powierzchniach architektonicznych i wyposażenia vd. Wartość vd, zależna od wielkości cząstek, zmienia się w granicach między 0,7 a  $4,7 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$  oraz 1,6 a  $7,8 \cdot 10^{-5} \text{ m/s}$ , odpowiednio dla cząstek frakcji drobnej i grubej.

Otrzymane wartości vd oraz obliczone średnie stężenia umożliwiły oszacowanie udziału poszczególnych źródeł w całkowitej liczbie cząstek pyłu, które mogą osiąść na jednostkowej powierzchni wewnętrznej w ciągu roku Ndep. Analiza tego syntetycznego wskaźnika brudzenia pozwala porównywać obiekty między sobą w kontekście źródeł wewnętrznych i zewnętrznych w okresie zimnym i ciepłym oraz określać potencjalny wpływ ogrzewania lub też jego brak.

Wyznaczone wartości szybkości osiadania wykazują dość znaczną zmienność dla obu frakcji wielkościowych i dobrze zgadzają się z danymi literaturowymi dla pomieszczeń z relatywnie niskim przepływem powietrza i znaczną szorstkością powierzchni osiadania. Zaobserwowano również wpływ intensywnych strategii grzewczych z podwyższoną średnią temperaturą wewnętrzną na zwiększoną szybkość osiadania cząstek.

Dodatkowa analiza numeryczna pozwala stwierdzić, że zmniejszanie współczynnika AER przy stałym współczynniku penetracji, w przypadku historycznych budowli takich jak badane obiekty sakralne, ma ograniczony wpływ na obniżenie średniego stężenia pyłu zawieszonego wewnątrz (mniejszy niż 10%), a jedynie wygładza szybkozmienne wahania stężenia pyłu wewnątrz.



## **Grant Rozwojowy**



## **1. Enzymatyczna synteza aktywnych biologicznie regioselektywnie odwodornionych triterpenów pentacyklicznych**

*(dr Agnieszka Wojtkiewicz)*

Projekt Rozwojowy IKiFP PAN nr 1/GR/2024 [2024-2026]

Celem projektu jest opracowanie metody biokatalitycznego utleniającego odwodornienia nowych triterpenów pentacyklicznych (TP) z wykorzystaniem enzymu z rodziny dehydrogenaz 3-ketosteroidowych (KSTD). Projekt zakłada przygotowanie nowych związków o potencjale prozdrowotnym w ilościach umożliwiających badania aplikacyjne oraz rozwinięcie technologii do skali półtechnicznej.

W pierwszym roku zrealizowano kluczowe działania. Opracowano hodowlę bakterii z wykorzystaniem pożywki minimalnej w skali 5 L, osiągając dziesięciokrotny wzrost biomasy w porównaniu do hodowli LB, a proces został z powodzeniem przeskalowany do 35 L. Opracowano również szybką metodę izolacji enzymu, choć wykazano niską stabilność katalizatora podczas przechowywania. Przeprowadzono syntezy w skali 0,1 L dla trzech nowych TP, uzyskując nieopisane dotąd produkty. Opracowano metody LC-MS i TLC do monitorowania reakcji oraz utworzono stanowisko do oczyszczania produktów, choć optymalizacja tej metody nadal trwa. Wyniki syntez są w trakcie dalszej analizy i oczyszczania. Przygotowano dwa wnioski patentowe oraz złożono dwa wnioski grantowe do NCN i FNP na finansowanie dalszych badań.

W drugim roku planowane jest zwiększenie skali syntez do 0,9 L, opracowanie efektywnej metody oczyszczania produktów, przeprowadzenie badań biologicznych, złożenie produktów w Krajowej Bibliotece Związków Chemicznych OPENSREEN, finalizacja wniosków patentowych, napisanie publikacji oraz kontynuacja aplikacji o zewnętrzne finansowanie.

## 2. Hybrydowe kompozyty mineralne otrzymywane metodą heterokoagulacji, jako efektywne nanomateriały wychwytywania CO<sub>2</sub>

(dr hab. Małgorzata Zimowska)

Projekt Rozwojowy IKiFP PAN nr 2/GR/2024 [2024-2026]

Zgodnie z koncepcją Zielonej Chemii podczas projektowania i prowadzenia procesów chemicznych kluczowe jest zrównoważone wykorzystanie zasobów, redukcja stosowania oraz wytwarzania szkodliwych materiałów i chemikaliów, redukcja emisji gazów cieplarnianych. Należy więc dążyć do wykorzystywania surowców odnawialnych oraz prowadzenia procesów katalitycznych mających na celu obniżenie poziomu CO<sub>2</sub> w atmosferze bądź jego transformację w bardziej pożądane produkty w zastosowaniach przemysłowo-środowiskowych.

Niniejszy projekt ma na celu opracowanie innowacyjnych podwójnie funkcjonalizowanych, hybrydowych kompozytów mineralnych (anionowo-kationowych szczotek mineralnych) o charakterze zasadowym, aktywnych w wychwytywaniu i sekwestracji CO<sub>2</sub> z gazów spalinowych. W projekcie skupiliśmy się na otrzymaniu i modyfikacji prekursorów hydrotalkitowych, ich pochodnych otrzymanych w wyniku traktowania termicznego oraz hybryd, anionowo-kationowych szczotek mineralnych wygenerowanych na matrycy fyllokrzemianu, smektytu pełniącego funkcję platformy strukturotwórczej. Nasze badania skoncentrowały się na szczegółowej analizie modyfikacji strukturalnej kompozytów mineralnych i ich wpływowi na rozwój zwiększonej zdolności sorpcyjnej CO<sub>2</sub>.

W pierwszym etapie stosując metodę współstrącania, otrzymano serię anionowych warstwowych podwójnych wodorotlenków, o strukturze hydrotalkitu, (ang. LDH)  $[M^{2+}_{1-x}M^{3+}_x(OH)_2][An^-]_{x/n} \cdot mH_2O$ , o składzie Mg-Al=2:1, 3:1, 5:1, różniących się czasem starzenia, stopniem krystaliczności oraz wielkością ziaren hydrotalkitu, kontrolowanych warunkami syntezy. Otrzymane materiały zostały scharakteryzowane z wykorzystaniem metod XRD, FTIR, SEM/EDS, oraz adsorpcji/desorpcji N<sub>2</sub>, w celu przeprowadzenia korelacji strukturalno-sorpcyjnej. Badania jakościowo-ilościowe wygenerowanych centrów zasadowych zostały przeprowadzone z wykorzystaniem metod spektroskopowych *in situ* z wykorzystaniem cząsteczki sądy CO<sub>2</sub> oraz Temperaturowo-Programowanej Desorpcji CO<sub>2</sub>. Zbadano wpływ parametrów syntezy na naturę generowanych centrów zasadowych ich moc, kinetykę procesu adsorpcji/desorpcji CO<sub>2</sub> oraz pojemność sorpcyjną.

Otrzymane prekursory posiadały krystaliczną strukturę charakterystyczną dla hydrotalkitu o symetrii romboedrycznej R3m i wielkości krystalitów 10, 20 i 30 nm, a krystality powstałego tlenku MgO miały wielkość 3-6 nm. Badania spektroskopowe FTIR anionowych prekursorów hydrotalkitopodobnych oraz ich mieszanych tlenków, wykazały, że CO<sub>2</sub> reaguje z centrami O<sup>2-</sup> i OH<sup>-</sup> tworząc jony węglanowe (CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>) i wodorowęglanowe (HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>). Węglany i wodorowęglany powstają przy niskich pokryciach powierzchni i nie ma preferencji, które centra zasadowe O<sup>2-</sup> czy OH<sup>-</sup> reagują z CO<sub>2</sub> w pierwszej kolejności. Traktowanie w próżni wpływa na proces generowania wolnych grup OH oraz tworzenie węglanów i wodorowęglanów. Czas starzenia i krystaliczność wpływa na dostępność generowanych centrów zasadowych oraz ilość powstających grup OH<sup>-</sup>, z których tylko część (wolne grupy OH<sup>-</sup>) jest na tyle zasadowa, aby reagować z CO<sub>2</sub>. Kalcynacja wyraźnie zwiększa zasadowość hydrotalkitu, centra O<sup>2-</sup> wykazują wyższą moc niż grupy OH<sup>-</sup>. Preparaty kalcynowane, mieszane tlenki, tworzą więcej węglanów niż ich prekursory, co jest wynikiem większej liczby dostępnych centrów O<sup>2-</sup>.

## **Projekty badawcze NCN „Sonata Bis”**



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

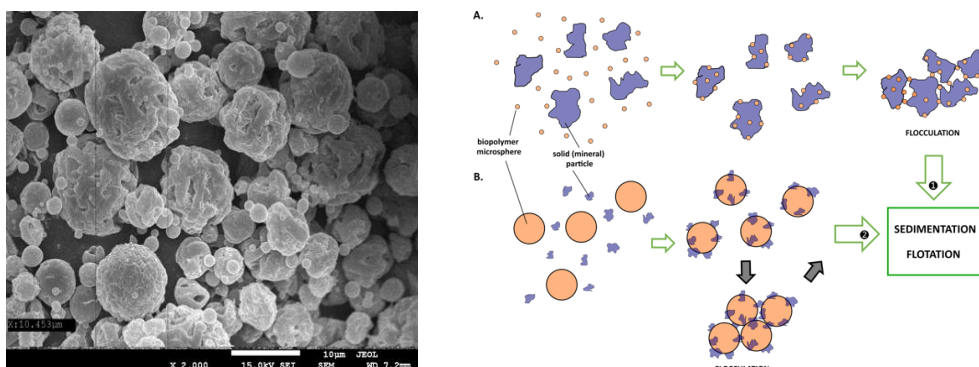
Projekt badawczy „SONATA BIS” NCN 2020/38/E/ST8/00173 [2021-2025]

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

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 opracowano koncepcje wykorzystania cząstek biopolimerowych pochodzenia bakteryjnego jako potencjalnych odczynników wspierających efektywność procesów separacji grawitacyjnej cząstek użytecznych minerałów. Podstawowa zaletą opracowywanych cząstek biopolimerowych jest ich biodegradowalność, a co za tym idzie brak negatywnego wpływu na środowisko naturalne. W założeniu, cząstki (sfery) biopolimerowe o rozmiarach w granicach 70 – 500 nm mają działać jak odczynniki flokulujące, które powodują aglomerację cząstek fazy drobnej i wzrost ich rozmiarów, znacznie przyspieszając szybkość sedymentacji lub zwiększając prawdopodobieństwo odzysku w procesie flotacji. Ponadto, adsorpcja mikrosfer polimerowych na cząstkach mineralnych docelowo spowoduje wzrost szorstkości powierzchni oraz stopnia hydrofobowości, co znacznie zwiększy efektywność tworzenia się agregatów flotacyjnych (pęcherzyka-ziarno mineralne). Schematyczny mechanizm działania cząstek biopolimerowych przedstawiono na rys. 1AB.

Prace prowadzone w okresie sprawozdawczym miały na celu opracowanie metodologii syntezy cząstek, jak również protokołów modyfikacji ich powierzchni. Badania mikroskopowe potwierdziły skuteczność opracowanych metod – uzyskane cząstki charakteryzowały się dość dużym stopniem polidispersyjności, ale posiadając dodatki ładunek powierzchniowy, efektywnie adsorbowały się na przeciwnie naładowanych powierzchniach stałych. Wstępne testy potwierdziły, że obecność cząstek polimerowych na powierzchniach płytek szklanych (użytych jako modelowa powierzchnia o ładunku ujemnym) znacznie skraca czas powstawania kontaktu trójfazowego (adhezji pęcherzyka powietrza). Ponadto, dodatek określonej ilości cząstek do roztworu zawiesiny cząstek kwarcu powodował ich aglomerację i szybszą sedymentację.



Rys. 1. Zdjęcie otrzymanych cząstek biopolimerowych (polimer pochodzenia bakteryjnego, zdjęcie ze Skaningowego Mikroskopu Elektronowego) oraz schematyczny mechanizm działania cząstek jako odczynników flokulujących, zwiększających efektywność odzysku grawitacyjnymi metodami separacji.

## 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 inż. Ewa Młyńczak)

Projekt TopoTin został rozpoczęty 15.03.2023 roku. Od 01.10.2023 w projekt zaangażowani są doktoranci Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkoły Doktorskiej (KISD) Ardra Surendran oraz Smibin Shaju. Realizacja projektu przebiega zgodnie z założonym planem, jesteśmy w trakcie wykonywania zadań przewidzianych w planie w drugim roku realizacji projektu.

W naszej pracy wykorzystujemy metodę epitaksji z wiązek molekularnych do przygotowywania próbek cienkowarstwowych związków międzymetalicznych zawierających Sn oraz Fe. Depozycje próbek przeprowadzamy w układzie ultrawysokiej próżni w IKiFP. Następnie, próbki są charakteryzowane w warunkach próżniowych z wykorzystaniem dyfrakcji elektronów niskoenergetycznych (LEED) oraz spektroskopii fotoelektronów wzbudzanych promieniowaniem X (XPS). Dla części próbek przeprowadziliśmy również pomiary skaningowej mikroskopii tunelowej (STM) po przeniesieniu ich w warunkach próżniowych za pomocą tzw. walizki próżniowej do pracowni STM w IKiFP. W projekcie wykorzystujemy dostęp do Narodowego Centrum Promieniowania Synchrotronowego Solaris, który przyznawany jest po ocenie wniosków przez międzynarodowy zespół ekspertów. W roku 2024 zrealizowaliśmy jeden eksperyment na linii DEMETER z użyciem stacji końcowej PEEM (elektronowy mikroskop fotoemisyjny) oraz dwa eksperymenty z użyciem linii Phelix (kątowo-rozdzielcza fotoemisja, ARPES). Do części eksperymentów synchrotronowych wykorzystaliśmy próbki przenoszone w walizce próżniowej z naszego laboratorium do Solaris. Dalsza charakterystyka przeprowadzana była przy użyciu metod ex-situ, po przykryciu próbek warstwą ochronną (m.in. mikroskopia sił magnetycznych MFM, dyfrakcja rentgenowska XRD, spektroskopia Mossbauerowska CEMS, transmisyjna mikroskopia elektronowa TEM). W roku 2024 skupiliśmy się na badaniach właściwości magnetycznych oraz elektronowych warstw  $\text{Fe}_3\text{Sn}_2$  oraz  $\text{FeSn}$  przygotowywanych na monokrystalicznym podłożu  $\text{Pt}(111)$  lub na cienkiej warstwie  $\text{Pt}(111)$  pre-deponowanej na kryształach  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ . Warstwy  $\text{Pt}(111)$  nanoszone były metodą sputteringu (współpraca z Instytutem Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie, prof. Andrzej Wawro). Kontynuowaliśmy również badania nad wzrostem ultracienkich warstw Sn na podłożu  $\text{Pt}(111)$ , z wykorzystaniem mikroskopii na elektronach niskoenergetycznych LEEM oraz skaningowej mikroskopii tunelowej STM. Efektem prac w projekcie w roku 2024 jest szereg wystąpień ustnych ogłoszonych przez dr hab. Ewę Młyńczak (3 konferencje międzynarodowe oraz 2 seminaria na zaproszenie: Uniwersytet Wrocławski oraz Instytut Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie) oraz 2 prezentacje plakatowe na międzynarodowych konferencjach zaprezentowane przez doktorantów Ardrę Surendran oraz Smibina Shaju.

## **Projekty badawcze NCN „Sonata”**



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

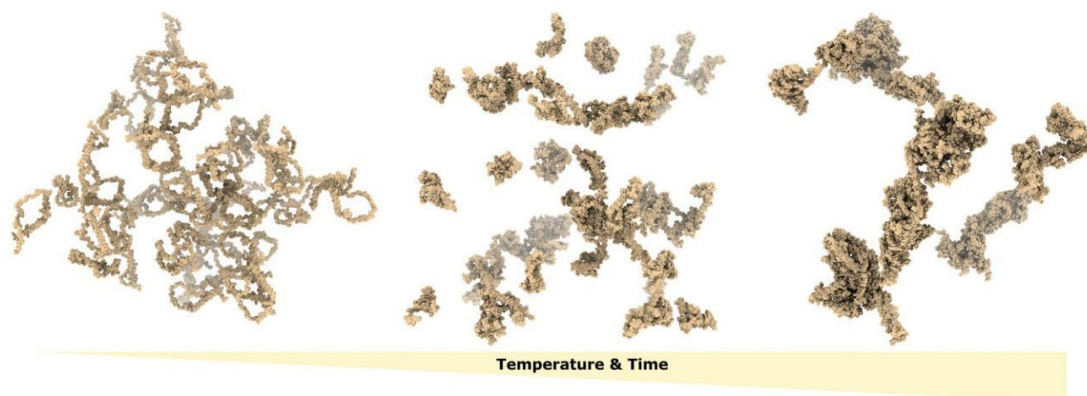
Projekt badawczy "SONATA" NCN 2018/31/D/ST5/01866 [2019-2024]

(kierownik projektu: dr hab inż. Piotr Batys, prof. IKiFP PAN)

Opracowano nowatorski hybrydowy projekt biomimetyczny, tj., ukierunkowany proces projektowania umożliwiającego przewidywanie struktur nowych polipeptydów zawierających struktury  $\alpha$ -helisy inspirowane naturą, ale o większej stabilności molekularnej. W pierwszym etapie, wykorzystano modele głębokich sieci neuronowych i wieloskalowego modelowania obliczeniowego, aby wybrać sekwencje polipeptydów o pożądanych właściwościach. Modelowanie MD pozwoliło wykluczyć część struktur ze względu na ich niską stabilność oraz wskazać te najbardziej obiecujące. Następnie opracowano genetycznie dwadzieścia pięć zaprojektowanych de novo wariantów polipeptydów do rekombinacyjnej ekspresji w *Escherichia coli*. Spośród nich, ekspresja powiodła się dla 15 wariantów, z czego 10 wariantów o największej wydajności wybrano do dalszych badań. Przeprowadzono dalsze obszerne symulacje MD z rozdzielczością atomową dla wszystkich 10 uzyskanych eksperymentalnie polipeptydów. Układy zawierające wiele cząsteczek polipeptydów symulowane były w zmiennej temperaturze, aby sprawdzić interakcje pomiędzy cząsteczkami polipeptydów oraz ich zdolność do separacji faz (Rys. 1). Symulacje wskazały, że w podwyższonej temperaturze, polipeptydy łączyły się w skupiska, co wskazuje na istnienie dolnej temperatury krytycznej roztworu (LCST). Ta cecha jest niezbędna do regulowania zachowania fazowego roztworów polipeptydów a zatem umożliwia ich dalsze wykorzystanie do produkcji funkcjonalnych materiałów o programowalnych właściwościach.

Ponadto, wyznaczono profile PMF (potential of mean force) w celu określenia energii swobodnej asocjacji  $\alpha$ -helis. Wyniki wykazały, że  $\Delta G_{\text{assoc}}$   $\alpha$ -helis była w granicach od -5 do -75 kJ/mol, a zatem asocjacja była korzystna energetycznie dla wszystkich badanych polipeptydów. Energia swobodna asocjacji korelowała z dolną temperaturą krytyczną roztworu, co wskazuje, że właściwości fazowe takich polipeptydów również mogą być przewidywane na drodze symulacji MD.

Otrzymane polipeptydy wykazywały przestrajalne, samoorganizujące się struktury i zachowanie fazowe, zarówno *in silico*, jak i *in vitro*. Najbardziej obiecujące warianty, wykorzystano jako programowalne termoreaktywne matryce do wstrzykiwania i modulatory przepuszczalności dla inteligentnych okien.



Rys. 1. Wieloskalowe symulacje pełno atomowej dynamiki molekularnej (MD) separacji faz polipeptydu UnsELP-AI.PH45 pod wpływem temperatury

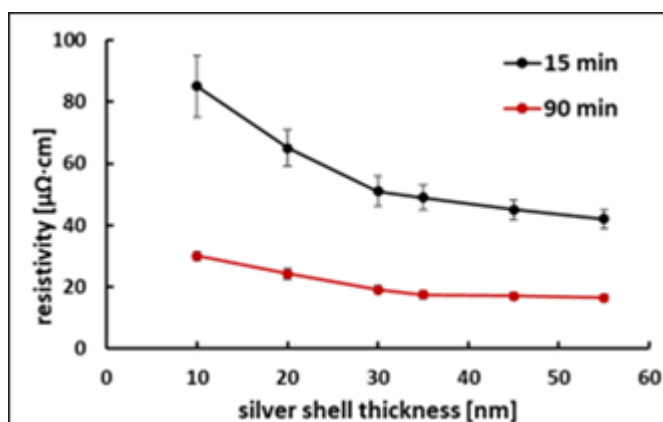
## 2. Udoskonalenie przewodnictwa drukowanych ścieżek poprzez optymalizację procesu syntezy oraz właściwości fizykochemicznych nanocząstek metali

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

(kierownik projektu: dr hab. Anna Pajor-Świerzy)

W ostatnich latach elektronika „drukowana” wzbudza duże zainteresowanie w związku z możliwością jej wykorzystania w wielu dziedzinach naszego życia począwszy od wytwarzania inteligentnych opakowań po innowacyjne rozwiązania medyczne. W procesie tym wykorzystywane są tusze i pasty głównie na bazie nanocząstek (NPs) metali, co związane jest z ich specyficznymi oraz unikatowymi właściwościami. Na jakość drukowanych ścieżek elektronicznych wpływają m.in. takie parametry jak właściwości tuszu/pasty, rodzaj substratu oraz metody druku. W celu uzyskania obwodów elektronicznych o satysfakcjonujących właściwościach parametry te muszą zostać zoptymalizowane i być ze sobą kompatybilne. W tym kontekście proces formowania drukowanych materiałów przewodzących obejmuje trzy etapy: (1) przygotowanie tuszu na bazie nanocząstek, (2) jego osadzanie lub drukowanie za pomocą odpowiednich technik oraz (3) obróbkę uzyskanych powłok lub obwodów po drukowaniu, np. suszenie i spiekanie. Dotychczas nanocząstki srebra były najczęściej wykorzystywane jako funkcjonalny komponent nanomateriałów przewodzących. Jednakże ich wysoki koszt oraz ograniczone właściwości mechaniczne ograniczają zastosowanie Ag NPs na szerszą skalę przemysłową. Nikiel, który posiada zarówno dobre właściwości przewodzące jak i mechaniczne a ponadto jest metalem znacznie tańszym może z powodzeniem zastąpić srebro w procesie otrzymywania materiałów przewodzących. Pojawia się jednak problem niestabilności 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).

W trakcie prac przeprowadzonych w roku 2024 opracowano niskotemperaturową metodę wytwarzania powłok przewodzących na bazie Ni-Ag NPs łączącą wykorzystanie kwasu szczawiowego (OA) i procesu spiekania UV-Vis. Poddanie osadzonych powłok działaniu OA i procesu napromieniowania UV-Vis pozwoliło na uzyskanie materiałów wykazujących wyższą przewodność w porównaniu do tych poddanych działaniu tylko kwasu szczawiowego lub promieniowaniu UV-Vis. Zauważono również, że opór właściwy spiekanych warstw zależy od grubości srebrnej powłoki nanocząstek Ni-Ag. Jego wartość malała wraz ze wzrostem grubości srebrnej otoczki (rysunek 1). Uzyskane wyniki są obiecujące odnośnie wykorzystania zmodyfikowanej metody spiekania opartej na procesie niskotemperaturowym do uzyskiwania struktur przewodzących z przyszłym zastosowaniem w produkcji „elastycznej” elektroniki.



Rys. 1. Zależność rezystywności powłok na bazie Ni-Ag NPs od grubości srebrnej powłoki po traktowaniu 1% OA (krzywa czarna) i po użyciu dwóch metod (1% OA i UV-Vis, krzywa czerwona).

### **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 metalicznych takich jak m.in. srebra lub miedzi, 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 (01.01-31.12.2024r.) było nałożenie warstwy (lub warstw) GO na powierzchnię złota w powtarzalny oraz jednorodny sposób. Przeprowadzona została pełnacharakterystyka fizykochemiczna i porównanie suspensji tlenku grafenu od różnych producentów (m.in. Sigma Aldrich, Plasma Chem, Abalonyx). Charakterystyka fizykochemiczna tlenku grafenu oraz syntezowanych metodą chemicznej redukcji nanocząstek Cu/Ag obejmowała m.in. określenie wielkości, wartości potencjału zeta, stabilności oraz składu i obecności grup funkcyjnych z wykorzystaniem metod m.in. DLS, UV-Vis, SEM oraz XPS. Jako modelowe powierzchnie do tlenku grafenu/nanocząstek zostały wykorzystane kryształy do mikrowagi kwarcowej z monitorowaną dyssypacją energii (QCM-D), których powierzchnia pokryta jest złotem oraz złote sensory SPR. Do formowania warstw wykorzystana została technika „warstwa po warstwie” (z ang. „*layer-by-layer*”, LbL) polegająca na adsorpcji przeciwnie naładowanych nano-objektów z wykorzystaniem m.in. metod: zanurzeniowej, natryskowej (z ang. „*air brushing*”), powlekania obrotowego (z ang. „*spin coating*”) oraz metodę adsorpcji GO na powierzchniach złota pokrytych tiolami. Dodatkowo z wykorzystaniem metod: AFM, SEM oraz ATR-FTIR określono topologię, pokrycie, szorstkość powierzchni oraz strukturalne i spektralne właściwości badanych układów. Nanoszona warstwa (lub warstwy) GO powinny charakteryzować się dużym pokryciem powierzchni, dużą stabilnością oraz homogenicznością. Obecnie prace mają na celu optymalizację osadzania GO w sposób kontrolowany, powtarzalny, jednorodny, a następnie weryfikację pokrycia powierzchni złota warstwą (lub warstwami) GO, w celu wybrania do dalszych prac najbardziej optymalnej metody otrzymywania podłoża z warstwą złota oraz tlenku grafenu.

#### **4. Oddziaływania liposacharydów bakteryjnych z „X” kształtnymi oligomerami peptydowymi na granicy faz: Czynniki-X w strategii przeciwdrobnoustrojowej?**

Projekt badawczy "SONATA" NCN 2023/51/D/ST4/02300 [2024-2027]

(kierownik projektu: dr Magdalena Włodek)

Zrozumienie struktury oraz oddziaływań w otocze komórek bakteryjnych jest niezbędne do tworzenia nowych leków przeciwdrobnoustrojowych. Bakterie Gram-ujemne są w szczególności trudnym celem, ponieważ posiadają dodatkową, wysoce asymetryczną błonę zewnętrzną, zbudowaną z lipopolisacharydów (LPS). Częsteczka LPS jest zbudowana z trzech różniących się pod względem strukturalnym części: lipidu A, oligocukru oraz antygeny O. Głównym celem projektu jest zbadanie oddziaływań pomiędzy cząsteczkami LPS z powierzchniami o różnych właściwościach chemicznych, w szczególności oligo-glicin (X-kształtny peptyd). Wyniki mają dostarczyć informacji przede wszystkim na temat zastosowania X-kształtnego peptydu do wychwytywania (a następnie neutralizacji) Gram-ujemnych bakterii na powierzchniach. Podjęte zadanie badawcze będzie stanowić nowe zagadnienie naukowe o znaczeniu praktycznym, które doprowadzi do innowacyjnych rozwiązań i nowych zastosowań biomedycznych.

W pierwszym etapie badań planowane jest zrozumienie wpływu warunków roztworu na samoorganizację LPS/Lipid A oraz optymalizacja przygotowania liposomów LPS. Liposomy LPS będą przygotowywane metodą standardowej ekstruzji. Ekstruzja to jednoetapowy proces, w którym liposomy powstają poprzez przepuszczanie zawiesin lipidowych przez filtry o określonej wielkości porów.

W 2024 r. zakupiono i zbudowano układ do przeprowadzania ekstruzji liposomów zawierających LPS/Lipid A oraz LPS, z użyciem ekstrudera ciśnieniowego z podgrzewaną łaźnią cyrkulacyjną.

## **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

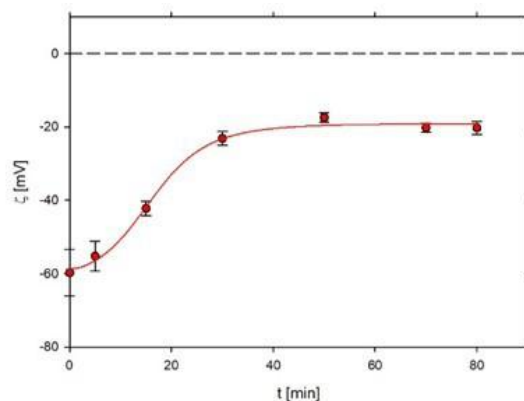
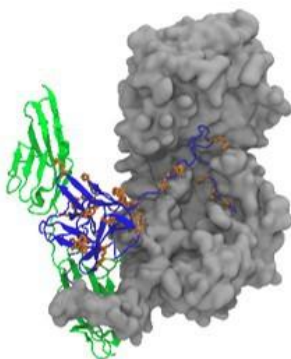
Projekt badawczy "OPUS" NCN 2018/31/B/ST8/03277 [2019-2024]

(kierownik projektu: dr hab. Aneta Michna)

Głównymi celami, ukończonego w marcu 2024 roku projektu, było opracowanie efektywnej metody wytwarzania biokompatybilnych wielowarstw polielektrolitowych, ze szczególnym uwzględnieniem polisacharydów, umożliwiających przyłączanie i, w kontrolowanych warunkach, uwalnianie dwóch rodzajów czynników wzrostu fibroblastów (CWF): CWF21 i CWF 23, co może znaleźć zastosowanie w leczeniu chorób cywilizacyjnych.

W minionym roku dokonano charakterystyki fizykochemicznej CWF 23 za pomocą modelowania dynamiką molekularną (MD) oraz zaawansowanych technik eksperymentalnych, tj. wielokątowego dynamicznego rozpraszania światła, potencjału przepływu, reflektometrii, mikrowagii kwarcowej z dyssypacją energii. Po raz pierwszy w literaturze przedmiotu określono: kształt molekuly, pole przekroju, zależność ładunku nominalnego od pH oraz wartość punktu izoelektrycznego - IEP 9,2. Wykazano, że ładunek elektrokinetyczny CWF 23 zależy od pH i maleje od 25e w pH 4 do -5e w pH 10. CWF. Ponadto, CWF 23 odwracalnie adsorbuje się ujemnych powierzchniach twardych (krzem utleniony, mika) co wykazały pomiary reflektometryczne i grawimetryczne (QCM-D). Maksymalny stopień pokrycia CWF 23 na powierzchni krzemu w 0.01 M NaCl, pH 5.8 utlenionego wynosił 2,8 g/m<sup>2</sup>, a po odmywaniu w kontrolowanych warunkach, malał do 1,2 g/m<sup>2</sup> (pomiary reflektometryczne). Wykazano, że CWF23 w tych samych warunkach (siła jonowa 0,01 M, pH 5.8) odwracalnie adsorbuje się na powierzchni miki, zmniejszając ujemny potencjał substratu z - 60 mV do -20 mV.

Zrealizowany projekt miał wpływ na opracowanie metodologii badawczej umożliwiającej tworzenie nowych biomateriałów jako efektywnego rusztowania do adsorpcji i kontrolowanego uwalniania czynników wzrostu fibroblastów (CWF). Przeprowadzone badania udowodniły czołową rolę oddziaływań elektrostatycznych w procesach wiązania białek z biomateriałami, co ma znaczenie dla rozwoju dyscypliny ze względu na brak w literaturze przedmiotu danych eksperymentalnych, uzyskanych dla układów modelowych w warunkach *in situ*, popartych analizą teoretyczną. Oprócz znaczenia poznawczego, zdobyta wiedza umożliwi w przyszłości zaprojektowanie nowych materiałów o pożądanych właściwościach np. intensyfikujących proliferację komórek i ich przeżywalność, pokryć biobójczych oraz biosensorów służących do selektywnego wychwytu i wiązania określonego rodzaju białek z surowicy krwi.



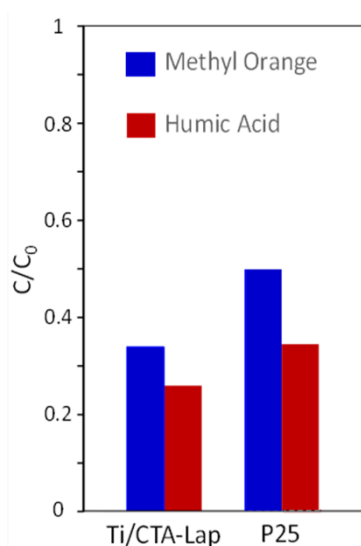
Rys. 1 a) CWF 23 oddziałuje z białkiem klotho (obliczenia numeryczne z użyciem dynamiki molekularnej autorstwa dr hab. Pióra Batysa, prof. IKiFP PAN) b) Zależność potencjału zeta CWF 23 zaadsorbowanego na micy od czasu adsorpcji. Pomiary wykonano w sile jonowej 0,01 M NaCl, pH 5.8 (technika potencjału przepływu)

## 2. Nowe kompozyty smektytów z nanocząstkami TiO<sub>2</sub> 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)

Badania prowadzone w ramach projektu zakończonego w 2024 roku miały na celu zaprojektowanie i syntezę nowego typu fotokatalizatorów kompozytowych otrzymanych przez integrację dwóch procedur syntetycznych: jednej polegającej na tworzeniu cząstek TiO<sub>2</sub> w odwróconej mikroemulsji, tj. w nanokroplach wody zdyspergowanych w cieczy organicznej, oraz drugiej, polegającej na delaminacji minerałów ilastych. W rezultacie otrzymano nowy rodzaj kompozytów TiO<sub>2</sub>/smektyt, składających się z nanocząstek TiO<sub>2</sub> unieruchomionych pomiędzy eksfoliowanymi warstwami smektytu. Jako nośniki TiO<sub>2</sub> zastosowano różne modyfikacje montmorylonitu, najpopularniejszego naturalnego smektytu, oraz laponitu, syntetycznego smektytu o najszerszym spektrum zastosowań przemysłowych. Nowo opracowane materiały kompozytowe zostały przetestowane jako fotokatalizatory do oczyszczania wody z zanieczyszczeń organicznych, głównie tych, które dostają się do kanalizacji i akwenów wodnych w dużych ilościach, takich jak rozpuszczalne w wodzie barwniki i kwasy humusowe. Aktywność kompozytów w fotodegradacji obu rodzajów zanieczyszczeń była bardzo wysoka, a najlepsze z nich przewyższały fotoaktywnością komercyjny nanoproszek TiO<sub>2</sub> P25, stosowany powszechnie jako punkt odniesienia w badaniach fotokatalitycznych (Fig.1).



Rys. 1. Porównanie wydajności fotokatalitycznej najlepszego katalizatora kompozytowego (TiO<sub>2</sub> osadzony na organo-Laponicie) i referencyjnego P25 w destrukcji oranżu metylowego (5×10<sup>-5</sup> M roztwór wodny) i kwasu humusowego (40 mgL<sup>-1</sup> roztwór wodny) po wpływie 5-godzinnego naświetlaniu lampą LED 365 nm, 50 W.

### 3. Gruboziarniste modelowanie węglowodanów

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2019/35/B/ST4/01149 [2020-2025]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Wojciech Plaziński)

#### **Obliczenia konformacyjne energii swobodnej z użyciem pola siłowego Martini 3. Opracowanie modelu rotujących wiązań i elastycznych pierścieni węglowodanów w Martini 3.**

W pierwszej części badań stworzono i przetestowano protokół obliczeniowy, który pozwala na oszacowanie względnych zmian energii swobodnej wynikających ze zmian konformacyjnych w cząsteczkach białek, wywołanych przez różne czynniki (mutacje reszt aminokwasowych, zmienne wartości pH, zmiany rozpuszczalnika itp.). Opracowany protokół oparty jest na gruboziarnistym (CG) polu siłowym Martini (w wersji 3) i wykorzystuje symulacje dynamiki molekularnej (MD) oparte na stopniowych zmianach parametru  $\lambda$ , który opisuje zmiany konformacyjne między dwoma predefiniowanymi stanami konformacyjnymi. Zmiana energii swobodnej związana z takim przejściem jest obliczana przy użyciu dowolnej metody opartej na formalizmie wykorzystującym  $\lambda$  (np całkowanie termodynamiczne, *Bennett acceptance ratio* lub *umbrella sampling*). Metoda ta została przetestowana na pięciu różnych układach biomolekularnych, w których zmiany konformacyjne białek są wywoływane przez modyfikacje warunków, w jakich znajduje się cząsteczka białka. Zaproponowane podejście jest proste i możliwe do zastosowania w ramach standardowej procedury stosowanej do przeprowadzania symulacji CG MD opartych na polu siłowym Martini. Wymaga jedynie znajomości dwóch (lub więcej) stanów konformacyjnych definiujących rozważane przejście konformacyjne oraz możliwości implementacji czynników wpływających na to przejście. Opisana procedura może być szczególnie przydatna w przypadku rozważania różnych czynników działających na ten sam układ, które mogą zakłócać dynamiczną równowagę między specyficznymi, dobrze zdefiniowanymi konformacjami białek. Wyniki opublikowano w artykule: [10.1021/acs.jctc.3c01155].

W drugiej części badań zajęto się opracowaniem modelu umożliwiającego uwzględnienie wybranych konformacyjnych stopni swobody (rotacji wiązań glikozydowych wraz z pobocznymi konformerami typu anti- oraz dystorsji pierścieni piranozowych) w nowo opracowanym [10.1021/acs.jctc.2c00553] polu siłowym Martini 3, przeznaczonym do symulacji sacharydów. Opracowano podejście polegające na gromadzeniu danych odniesienia oddzielnie, dla wszystkich stabilnych lub metastabilnych konformerów, a następnie łączenie zestawów takich danych z wagą odpowiadającą ich względnym populacjom w standardowych warunkach (wyznaczonym w symulacjach atomistycznych). Dane tego typu mogą być użyte np. do wyznaczenia wewnątrz-molekularnych potencjałów oddziaływań charakteryzujących się dużą dokładnością w kontekście uwzględnienia różnego rodzaju pobocznych minimów energii, które zazwyczaj są pomijane w procesie parametryzacji CG. Opracowana metoda jest obecnie w fazie implementacji umożliwiającej automatyczne, sprawne i elastyczne (w odniesieniu do dużej ilości możliwych układów) generowanie parametrów pola siłowego CG.

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

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

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

Magnetyt jest wyjątkowym materiałem ze względu na rzadkie w tlenkach połączenie właściwości magnetycznych i transportowych. Quasi-metaliczna przewodność magnetytu w podwyższonych temperaturach gwałtownie spada o dwa rzędy wielkości w wyniku przejścia Verweya (VT) przy około 125 K. Jednocześnie wysoka temperatura Curie sprawia, że cienkie warstwy magnetytu są interesujące dla spintroniki, ale ich właściwości magnetyczne i elektryczne ulegają znacznym modyfikacjom wraz ze zmniejszeniem grubości. W literaturze powszechne jest twierdzenie że granice domen antyfazowych (APB) które silnie wpływają na właściwości magnetyczne, są również odpowiedzialne za znaczne obniżenie przewodności elektrycznej. Niniejsze badania pokazują dodatkowe źródło tego efektu.

Punktem wyjściowym było porównanie pomiarów mössbauerowskich z detekcją elektronów konwersji (CEMS) *in situ* i *ex situ* dla ultracienkich epitaksjalnych warstwach magnetytu otrzymywanych i charakteryzowanych w warunkach UHV. Stwierdziliśmy, że te warstwy utleniają się w kierunku maghemitu podczas ekspozycji na warunki atmosferyczne. Z tego powodu, aby ujawnić rzeczywisty charakter zależności rezystywności od grubości w magnetycie, pomiary elektryczne powinny być przeprowadzane *in situ* w warunkach UHV. Było to możliwe dzięki zastosowaniu specjalnych uchwytów próbek z kontaktami elektrycznymi do ścieżek molibdenowych wstępnie osadzonych na MgO(001).

Epitaksjalne warstwy magnetytu  $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  o różnych grubościach były otrzymywane na MgO(001) metodą reaktywnego osadzania Fe w atmosferze tlenu przy ciśnieniu cząstkowym wynoszącym  $5 \cdot 10^{-6}$  mbar na podłożach utrzymywanych w temperaturze 530 K. Zmierzono zależność oporności od grubości i temperatury dla serii warstw  $\text{Fe}_3\text{O}_4(001)$  o grubościach od 2 nm do 50 nm. Zależność od grubości została przedyskutowano na bazie klasycznych modeli, co pozwoliło oszacować wkład od APB. Dla dostępnych temperatur pomiarowych ( $T_{\min} = 100$  K) znaleźliśmy przejście VT dla warstw o grubości nawet 5 nm. Zaobserwowano również wpływ adsorpcji tlenu i długotrwałego przechowywania w warunkach atmosferycznych na oporność elektryczną.

Zbadano także przejście Morina (MT) w epitaksjalnych warstwach hematytu hodowanych metodą epitaksji z wiązki molekularnej (MBE) na Pt(111). Warstwy otrzymywane w typowych warunkach nie wykazywały MT do 110 K. Otrzymano też warstwę hematytu nanoszoną w obecności zewnętrznego pola magnetycznego z wykorzystaniem nowo opracowanej technologii MBE wspomaganej polem magnetycznym. Na podstawie pomiarów CEMS, stwierdzono, że taka warstwa wykazuje słabą jednoosiową anizotropię indukowaną podczas wzrostu. Co więcej, pomiary CEMS w niskich temperaturach pokazały początek MT, którego nie było w nanoszonych bez pola magnetycznego. Obrazowanie XMLD-PEEM przeprowadzone w synchrotronie SOLARIS w temperaturze pokojowej potwierdziło strukturę domen antyferromagnetycznych (AFM) oczekiwaną dla jednoosiowej anizotropii. Obrazowanie w niskiej temperaturze (70 K), wykazało przejście typu spin-flop z domen AFM w płaszczyźnie na konfigurację prostopadłą do płaszczyzny. Przejście nie jest kompletne, a prostopadłe spiny współlistnieją z fazą AFM w płaszczyźnie.

## **5. Teranostyczne nanonośniki nowej generacji dla detekcji, diagnostyki i neuroprotektynowego 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 nagłe 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 neuroprotektynowych, do dotkniętej chorobą części mózgu, przez barierę krew-mózg przepuszczalną tylko dla małych, lipofilowych cząsteczek. Dodatkowo, niektóre leki neuroprotektynowe 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 neuroprotektynowym 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 2024 roku skupiliśmy się na tworzeniu teranostycznych nanonośników o strukturze rdzeń@powłoka, zawierających wybraną substancję neuroprotektynową kannabidiol (CBD). 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 kwasu glutaminowego. Rozmiar otrzymanych nanonośników mierzony metodą DLS był ~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 deprivacji 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

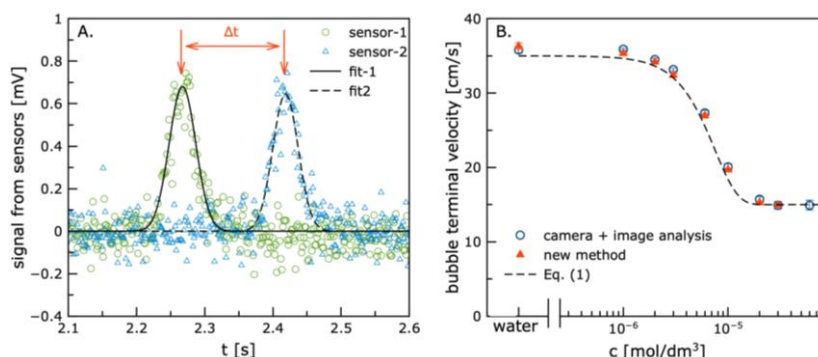
Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2021/43/B/ST8/00053 [2022-2025]

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

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 kontynuowano prace mające na celu konstrukcję prototypowego układu przeznaczonego do automatycznego pomiaru prędkości unoszącego się pęcherzyka w cieczy (roztworze wodnym). Zmodernizowano prototyp urządzenia, opracowując generator pojedynczych pęcherzyków oparty o analizę ciśnienia w układzie oraz wykonując obudowę urządzenia w technice druku 3D, w której zaprojektowano miejsca na matrycę fototranzystorową. Ponadto opracowano układ elektroniczny, pozwalający na pomiar sygnału prądowego, indukowanego obecnością pęcherzyka oraz opracowano automatyczny system akwizycji danych. Zasada jego działania polegała na dopasowaniu funkcji Gaussa do zbieranych punktów eksperymentalnych i automatycznym odczycie odległości pomiędzy maksimum (patrz rys. 1A). Na tej opracowane oprogramowanie zwracało średnią prędkość pęcherzyka na dowolnie wybranej odległości.

W okresie sprawozdawczym potwierdzono, że opracowana metoda cechuje się bardzo dużym potencjałem z uwagi na fakt, że otrzymywane wyniki były całkowicie zgodne z wynikami pomiarów z wykorzystaniem metody tradycyjnej, tj. polegającej na rejestracji ruchu pęcherzyków przy pomocy kamery i analizie obrazu (pomiarze odległości pomiędzy środkiem geometrycznym pęcherzyków przesuwających się pod wpływem siły wyporu za pomocą programu do analizy graficznej). Efekt ten przedstawiono na rys. 1B, gdzie zestawiono wartości średnich granicznych prędkości pęcherzyka w roztworach bromku n-heksadecylo-trimetyloammoniumowego (CTABu), otrzymane dwiema wspomnianymi metodami. Kolejnym krokiem będzie połączenie większej ilości fototranzystorów i wykorzystanie takiej matrycy do pomiarów tzw. profili prędkości pęcherzyków, w celu opracowania odpowiednich metod kalibracyjnych, mogących służyć do identyfikacji rodzaju i stężenia substancji powierzchniowo-aktywnych w próbkach wody pobranych z naturalnych zbiorników wodnych oraz ścieków.



Rys. 1. Dane przedstawiające (A) sygnał prądowy uzyskany z fototranzystorów z dopasowaną funkcją Gaussa, na podstawie którego obliczana jest średnia prędkość pęcherzyka w roztworze wodnym, (B) porównanie średnich granicznych prędkości pęcherzyka, zmierzonych dwiema metodami, w roztworach CTABu o różnym stężeniu.

## 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.

Do tegorocznych badań wybrano pochodną porfiryny(tetrakis(4-carboksyfenilo)porfiryne (TCPP)) oraz jej podwójnie sprotonowaną formę ( $H_2TCPP^{2+}$ ). Celem badań było określenie w jaki sposób częściowa protonacja porfiryny wpływa na naturę i właściwości fotowzbudzonych stanów cząsteczki TCPP. Badania obejmowały obliczenia w ramach Teorii Funkcjonałów Gęstości wykonane dla podstawowego stanu singletowego  $S_0$  i pierwszego trypletowego stanu wzbudzonego  $T_1$  układów TCPP i  $H_2TCPP^{2+}$ . Do wyznaczenia struktur geometrycznych i elektronowych użyto programu Gaussian 09. Stwierdzono, że kąty dwuścienne pomiędzy atomami stanowiącymi szkielet porfirynowy w TCPP zwiększają się nieznacznie przy zmianie geometrii towarzyszącej przejściu z  $S_0$  to  $T_1$ , co jest zgodne z wcześniejszymi wynikami badań doświadczalnych i teoretycznych. Zachowanie formy  $H_2TCPP^{2+}$  jest zupełnie inne: stwierdzono bardzo silne wygięcie jednostki tetrapirolowej już w podstawowym stanie  $S_0$ , a pogłębia się ono dodatkowo w stanie  $T_1$ . Obserwacje poczynione dla układów w stanie podstawowym są zgodne z wnioskami płynącymi z badań przy użyciu spektroskopii UV-VIS, które pokazują przesunięcie ku czerwieni pasma Soreta, wywołane przerwaniem układu sprzężonych wiązań  $\pi$  wywołane przez znaczne wygięcie pierścienia porfirynowego. Wysunęliśmy hipotezę, że skrócenie czasu życia stanu trypletowego, obserwowane po wzbudzeniu układu sprotonowanego ze stanu podstawowego, związane jest z opisanymi powyżej zmianami geometrii.

Stosując analizę populacyjną NBO wyznaczono ładunki zgromadzone na atomach azotu z fragmentów pirolowych. Ładunki te są zbliżone na wszystkich czterech atomach N w stanie  $T_1$ . Wykreślono również różnicowe mapy gęstości elektronowej dla stanów  $S_0$  i  $T_1$ , które pokazały zwiększenie gęstości elektronowej pirolowych atomów azotu w układach zdeprotonowanych w płaszczyźnie pierścienia porfirynowego (a zatem i wzrost ich właściwości nukleofilowych). Przeprowadzone badania umożliwiły wyjaśnienie efektu wzrostu zasadowości układu we wzbudzonym stanie trypletowym, obserwowanego przy użyciu technik spektroskopowych. Uzyskane wyniki dodatkowo potwierdza obecność wolnych par (na atomach azotu), które wiążą protony. Zwiększona jest gęstość elektronowa pod i nad płaszczyzną porfiryny, co odpowiada gęstości elektronowej na orbitalach p, które nie są zaangażowane w proces protonowania porfiryny.

## 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)

Głównym celem projektu jest stworzenie podstaw naukowych dla zrozumienia mechanizmu adsorpcji białek na powierzchni nanośników opartych na dendrymerach PAMAM oraz opracowanie metodologii otrzymywania stabilnych struktur hybrydowych o odpowiedniej funkcjonalności w sposób kontrolowany, które mogą być wykorzystane jako nośniki leków, materiały do testów immunologicznych czy materiały teranostyczne. Zastosowania dendrymerów w układach celowego dostarczania leków są spowodowane gwałtownym rozwojem nanofarmakologii. Struktura dendrymeru potencjalnie umożliwia dwa typy enkapsulacji czynnika terapeutycznego: w wielowarstwowej powłoce dendrymerowej lub wewnątrz struktury cząsteczki. Dendrymer może więc pełnić jednocześnie podwójną rolę w dostarczaniu lub uwalnianiu substancji aktywnej. Zrozumienie istoty oddziaływania pomiędzy lekami a nośnikiem jest ważne dla zrozumienia molekularnego mechanizmu optymalizacji oraz kontroli tego układu. Wszystkie nanonośniki po wprowadzeniu do układu biologicznego oddziałują z płynami biologicznymi. Tak więc, w celu opracowania selektywnego dostarczania leków stosując nanośniki, niezbędne jest zrozumienie zarówno zjawisk związanych ze zmianami konformacji jak i konkurencji białek do powierzchni międzyfazowej nośnika.

Realizacja projektu obejmuje trzy główne etapy badawcze. Pierwszym etap badań dotyczył oddziaływania białek osocza z powierzchnią dendrymeru PAMAM oraz charakterystyki tworzonej na powierzchni nanośnika otoczki białkowej (tzw. soft corona). Na tym etapie istotne było określenie stabilności utworzonych kompleksów oraz zmian natywnej struktury białek zaadsorbowanych na powierzchni międzyfazowej. Drugi etap badań obejmował optymalizację oddziaływania dendrymerów PAMAM z wybranymi substancjami terapeutycznymi poprzez tworzenie trwałego bioaktywnego kompleksu dendrymerowego. Ten etap badań jest kluczowy i stanowi podstawę do wyboru układów do końcowego etapu badań nad wpływem białek osocza na bioaktywne kompleksy dendrymeru. Do tej fazy badań zostały wybrane tylko stabilne konformacyjnie struktury. W ramach prowadzonych badań na obecnym etapie zoptymalizowano układy oparte o G4.0 PAMAM z 5-fluorouracylem (G4.0- 5FU) oraz G4.0 PAMAM z doksorubicyną (G4.0-DOX). Na każdym etapie zostały zastosowane komplementarne metody badawcze. Badania eksperymentalne zostały uzupełnione poprzez symulacje dynamiki molekularnej (MD). Symulacje komputerowe zostały przeprowadzone dla wybranych układów eksperymentalnych o największym potencjale aplikacyjnym (G4.0-5FU i G4.0-DOX) oraz potwierdziły mechanizm immobilizacji leku w strukturze nośnika. Badania biologiczne *in vitro* kompleksów G4.0 PAMAM z doksorubicyną (DOX) i 5 fluorouracylem (5-FU) wykazały ich istotny potencjał terapeutyczny. W modelach komórkowych najwyższą aktywność przeciwnowotworową odnotowano wobec komórek czerniaka złośliwego A375, co podkreśla możliwość wykorzystania tego kompleksu w terapii onkologicznej. Przykładowo stwierdzono, że preferowane warunki wiązania DOX z dendrymerem zachodzą w środowisku zasadowym, gdy cząsteczka DOX jest zdeprotonowana, co sprzyja jego stabilizacji i kontrolowanemu uwalnianiu w komórkach nowotworowych. Badania fluorescencyjne oraz krzywe uwalniania leku wskazały na odwracalny charakter wiązania DOX do nanonośnika, co jest kluczowe dla ograniczenia toksyczności ogólnoustrojowej. Co istotne, badane kompleksy wykazywały preferowaną lokalizację wewnątrzkomórkową (wykorzystano fluorescencyjne właściwości DOX) w porównaniu do wolnej formy leku, co zwiększa ich skuteczność terapeutyczną oraz specyficzność wobec komórek nowotworowych. Dodatkowo opracowane w ramach projektu sfunkcjonalizowano z białkami osocza w celu podniesienia ich efektywności wychwytu przez komórki nowotworowe. Otrzymane wyniki potwierdzają, że dendrymery G4.0 PAMAM mogą stanowić obiecującą platformę nośnikową dla leków przeciwnowotworowych, takich jak doksorubicyna czy fluorouracyl.

## 9. Nowa generacja surfaktantów wieloładunkowych o dedykowanej funkcjonalności

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

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

Głównym celem projektu jest opracowanie podstaw naukowych nowatorskiej strategii projektowania i wytwarzania wieloładunkowych surfaktantów o dedykowanej funkcjonalności oraz ocena ich przydatności. Kilka grup surfaktantów zostanie zsyntetyzowanych z różnymi jonowymi grupami o strukturze dendrytycznej. Szczególny nacisk tego projektu opiera się na hipotezie badawczej, że konieczne jest ustalenie związku między architekturą molekularną surfaktantu a ich zachowaniem na granicach faz i wykazanie, że znajomość parametrów strukturalnych i zachowania wieloładunkowych surfaktantów zarówno na powierzchniach jak i w roztworze - są niezbędne do zrozumienia ich właściwości adsorpcyjnych i agregacyjnych dla różnych potencjalnych zastosowań.

Zachowanie na powierzchni wodnych roztworów nowo zsyntetyzowanych dibromków 2-alkilo-N,N,N, N',N',N'-heksametylopropano-1,3-amoniowych z decyłowymi, dodecyłowymi i tetradecylowymi łańcuchami alkilowymi zostało zbadane zarówno eksperymentalnie, jak i teoretycznie. Wyniki pomiarów napięcia powierzchniowego zostały opisane za pomocą zmodyfikowanego modelu powierzchniowego quasi-dwuwymiarowego elektrolitu (mSTDE) adsorpcji jonowych surfaktantów, który został poparty symulacjami dynamiki molekularnej. Nasz wkład obejmuje zaprojektowanie, syntezę i charakterystykę nowej klasy kationowych surfaktantów typu dicefalic, rozgałęzionych na motywie metynowym, posiadających dwie symetryczne grupy trimetyloamoniowe, które stanowią dwugłowe analogi standardowych soli alkilotrimetyloamoniowych o strukturze głowa-ogonon. Dogodna droga syntezy i dobrane etapy oczyszczania pozwoliły na produkcję surfaktantów z wysoką wydajnością i o wysokiej czystości. Surfactanty typu dicefalic wykazywały niższą aktywność powierzchniową i wyższe wartości krytycznego stężenia micelnego (CMC) w porównaniu z ich odpowiednikami o pojedynczej głowie i pojedynczym ogonie. Można to przypisać przede wszystkim obecności silnych elektrostatycznych sił odpychających podwójnie naładowanych grup hydrofilowych i znacznej kondensacji przeciwjonów. Co więcej, symulacje dynamiki molekularnej wykazały skłonność do desorpcji środków powierzchniowo czynnych z powierzchni, nawet w rozcieńczonych roztworach, co ogranicza osiąganą stężenie powierzchniowe i powoduje mniejszy spadek napięcia powierzchniowego. Model adsorpcji mSTDE pozwala na dobry opis eksperymentalnych izoterm powierzchniowych za pomocą ograniczonego zestawu parametrów. Moc predykcyjna modelu została przedstawiona w analizie wpływu soli nieorganicznych na aktywność powierzchniową badanych surfaktantów. Nasze unikalne podejście pozwoliło nam uzyskać teoretyczne wyjaśnienie zachowania nowych surfaktantów na granicy faz woda/powietrze.

## 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)

Otrzymane wyniki badań dotyczą strukturalnych i funkcjonalnych właściwości enzymów zależnych od żelaza, które odgrywają kluczową rolę w cyklizacji związków naturalnych. Cyklizacja często zmienia właściwości związków, a tym samym ich aktywność. Klasycznym przykładem jest wykorzystywana przez bakterie reakcja otwarcia pierścienia w antybiotykach beta-laktamowych prowadząca do ich dezaktywacji. W badaniach realizowanych w 2024 roku skupiono się na enzymie ekstradiolowa dioksygenaza L-DOPY (DODA), odgrywającym kluczową rolę w biosyntezie barwników antyoksydacyjnych - betalain. Dzieje się to przez stereoselektywne rozerwanie wiązania pomiędzy atomami węgla 4 i 5 L-DOPY.

Zastosowanie udoskonalonego protokołu oczyszczania białka pozwoliło uzyskać większą wydajność z jednego litra pożywki. Stabilność termiczną oczyszczonego białka sprawdzono metodą FTS (ang. fluorescence thermal shift), wykazując najwyższą stabilność w buforach o pH 7.5-8. Dodatkowo stwierdzono, że dodatek glicerolu znacząco poprawia stabilność białka. Wystandardyzowano spektrofotometryczną metodę pomiaru kinetyki enzymu oraz ustalono optymalne warunki reakcji wybierając bufor MES o pH 6.0 jako optymalny dla aktywności enzymu BvDODA. Wyznaczono wartość stałej Michaelisa-Menten (KM) dla L-DOPY o wartości 0,14 mM, a model reakcji określono jako inhibicję substratową. Przeprowadzone badania pozwoliły na precyzyjne oznaczenie parametrów kinetycznych enzymu, co jest kluczowe dla dalszych badań nad mechanizmami cyklizacji związków czynnych biologicznie. Co więcej, uzyskany preparat białkowy umożliwia przeprowadzenie eksperymentów metodami Mössbauera, stopped-flow oraz pomiar parametrów kinetycznych względem tlenu jako substratu za pomocą elektrody tlenowej.

Przy użyciu metody siedzącej kropli otrzymano kryształy DODY związanej z nieaktywnymi analogami ligandów: mimosyną oraz 4-nitro-L-DOPĄ. Dane dyfrakcyjne zostały zebrane przy użyciu wiązki P13 synchrotronu DESY (EMBL, Hamburg). Struktury białek związane z ligandami zostały rozwiązane przy użyciu podstawienia molekularnego, a następnie udokładnione w oprogramowaniu phenix.refine.

Przeprowadzone studium obliczeniowe miało na celu odkrycie mechanizmu rządzącego stereoselektywnością DODY w odniesieniu do innych dioksygenaz, które katalizują rozerwanie wiązania pomiędzy atomami węgla 2 i 3 L-DOPY. Wykorzystano modelowanie molekularne, aby określić możliwe orientacje L-DOPY w trakcie wiązania się do miejsca aktywnego badanego enzymu w wybranych alternatywnych protonacjach L-DOPY. Obliczenia kwantowo-mechaniczne pozwoliły na otrzymanie diagramów energii potencjalnej produktów pośrednich oraz stanów przejściowych na podstawie założonego mechanizmu. Analiza barier energetycznych pozwoliła na określenie optymalnej z badanych protonacji L-DOPY oraz przewidywanego miejsca tworzenia się wiązania węgiel-tlen. Wyniki są spójne z charakterem produktu reakcji otrzymywanego eksperymentalnie.

Przeprowadzono porównanie sekwencji oraz struktur enzymów DODA dostępnych w literaturze oraz ich wariantów. Przeprowadzono ich zestawienia z wyszczególnieniem różnic w resztach aminokwasowych znajdujących się w analogicznych strukturach poszczególnych enzymów DODA, jak również z wyszczególnieniem różnic w obrębie aminokwasów konserwowanych. Stworzono odpowiednie statystyki oraz porównano otrzymane dane w kontekście różnic w aktywności badanych enzymów. Wykonany przegląd literatury oraz następcze badania bioinformatyczne pozwoliły na wyszczególnienie dziesięciu gatunków organizmów produkujących enzymy DODA, których dalsze badania są stosowne do celów projektu.

## 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]

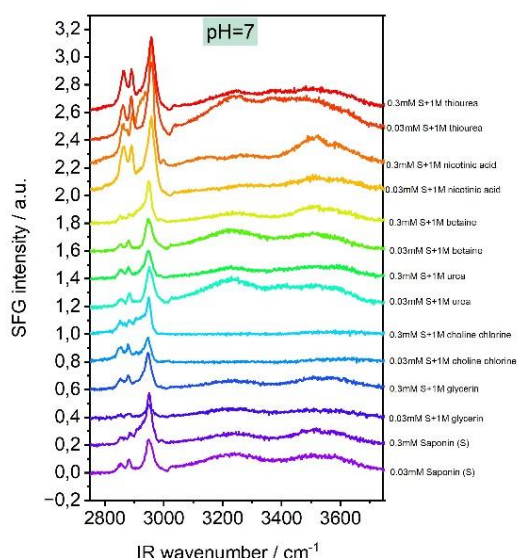
(kierownik projektu: dr Marcel Krzan)

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 zrealizować te cele, muszę wyjaśnić wpływ struktury molekularnej i efekty dynamicznej adsorpcji surfaktantów na różnych poziomach hierarchicznych w ciekłych funkcjonalizowanych pianach i emulsji od skali nano do skali makroskopowej. Dlatego proponuję przeprowadzenie serii testów z wykorzystaniem bezpiecznych modelowych związków powierzchniowo czynnych, które będą oddziaływać z „inteligentnymi” i naturalnymi bioaktywnymi lub terapeutycznymi biopolimerami lub nanocząstkami.

W tym celu badam właściwości adsorpcji i wytwarzania piany/emulsji na wszystkich poziomach: od oddziaływań molekularnych, gdzie parametry warstwy adsorpcyjnej będą analizowane za pomocą różnych tensjometrów, reometrów i spektrometrów (w tym spektroskopii Sum Frequency Generation spectroscopy), poprzez reologię cienkich warstw pianowych i ich stabilność (Thin Liquid Film Pressure Balanced Technique) aż do badania struktury, stabilności i właściwości reologicznej piany/emulsji.

W trakcie drugiego roku projektu zbadano właściwości pian i emulsji stabilizowanych biosurfaktantem saponiną, której właściwości adsorpcyjne były modulowane za pomocą dodatków będących akceptorami lub donorami wiązań wodorowych.

Jako dodatki wykorzystano w przypadku pian chlorek choliny, mocznik i glicerol. W przypadku emulsji rozszerzono listę dodatków o betainę, tiomocznik i kwas nikotynowy. W wyniku prac wykazano, że zarówno parametry adsorpcyjne, jak i właściwości tworzonych układów dyspersyjnych (pian i emulsji) zmieniają się drastycznie pod wpływem dodatków (w załączeniu wykres zmian parametrów adsorpcyjnych dla badanych układów z Sum Frequency Spectroscopy).



Rys. 1 Zmiany widm SFG IR saponiny pod wpływem różnych dodatków (akceptorów i donorów wiązań wodorowych) w pH 7

## **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)

W 2024 r. kontynuowano prace związane z charakterystyką białek hnRNPA2 i TDP 43 w roztworze oraz ich oligomeryzacji w różnych warunkach pH i siły jonowej. Poprzez zastosowanie obliczeń teoretycznych i różnych technik eksperymentalnych uzyskano kompleksowy wgląd w mechanizm oligomeryzacji białek wewnętrznie nieuporządkowanych. W szczególności skupiono się na opracowaniu efektywnej metody określania stopnia oligomeryzacji wewnętrznie nieuporządkowanej domeny hnRNPA2.

Badania AFM adsorpcji cząsteczek hnRNPA2 LCD na mice wykonane w warunkach transportu dyfuzyjnego dostarczyły wiarygodnych informacji na temat stabilności roztworów, a w szczególności na temat stopnia oligomeryzacji badanego białka (Rys.1). Potwierdzono, że warstwa białkowa składała się z quasi-kulistych oligomerów, których wielkość zależała od czasu przechowywania. Wykazano również, że stopień oligomeryzacji wzrastał wraz ze wzrostem siły jonowej elektrolitu, co sugeruje znaczącą rolę oddziaływań elektrostatycznych. Mechanizm oligomeryzacji białka został również szczegółowo zbadany poprzez zastosowanie adsorpcji na sferycznych cząstkach lateksowych, gdzie czas formowania monowarstwy był znacznie krótszy niż w przypadku substratów płaskich. Wykazano, że precyzja tych pomiarów była większa i dlatego można było uzyskać wiarygodne wyniki dla nanomolowych ilości białka zaadsorbowanych na sferycznych nośnikach. Wyniki te zostały też zinterpretowane ilościowo zgodnie z założeniami modelu elektrokinetycznego, który dostarczył wiarygodnych informacji o stopniu oligomeryzacji białka i pokryciu powierzchni. Wiedzę tę można wykorzystać do opracowania prostej metody ilościowego określania kinetyki oligomeryzacji niestabilnych roztworów białka. Można również oczekiwać, że otrzymane wyniki pozwolą na opracowanie procedury przygotowywania stabilnych koniugatów cząstek polimerowych o kontrolowanym pokryciu białka.

### 13. Wolframowa Oksydoreduktaza Aldehydów - nowa hydrogenaza. Badania mechanizmu reakcji i potencjalnych zastosowań biokatalitycznych.

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2023/51/B/ST4/01224 [2024-2028]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Maciej Szaleniec)

Projekt koncentruje się na przebadaniu niedawno odkrytej nowej aktywności wolframowej oksydoreduktazy aldehydów (AOR), która okazała się być nowym typem hydrogenazy. Nowo odkryta aktywność hydrogenazy AOR rozszerza jej standardowe możliwości katalityczne poza utlenianie szerokiej gamy aldehydów do kwasów karboksylowych o zdolność do utleniania wodoru. W efekcie utlenianie wodoru może zostać połączone z redukcją kwasów karboksylowych do aldehydów lub  $\text{NAD}^+$  do NADH. AOR jest enzymem pochodzącym z fakultatywnie anaerobowej bakterii *Aromatoleum aromaticum*. W swoim centrum aktywnym zawiera kofaktor wolframowy (W-co), w którym jon metalu jest koordynowany przez dwa kofaktory pterynowe, które z kolei dodatkowo połączone są przez jon magnezu. W-co jest połączony łańcuchem centrów żelazo-siarkowych z podjednostką zawierającą kofaktor FAD. System ten umożliwia transfer elektronów do koenzymu  $\text{NAD}^+$ . Tak więc, celem projektu jest zrozumienie tego nowego zjawiska katalitycznego oraz opracowanie metod jego zastosowania w praktyce.

Badania przeprowadzone w ramach projektu objęły szereg działań wstępnych i organizacyjnych takich jak opis protokołów genetycznych manipulacji *A. evansii* (rozdział w recenzji w *Methods in Enzymology*), czy przeprowadzenie 2L hodowli bakterii *A. evansii* zmodyfikowanej plazmidami kodującymi dwa warianty AOR (typ dziki oraz wersję zmutowaną, pozbawioną helisy umożliwiającej oligomeryzację). Bakterie zostały zebrane i przygotowano z nich kultury zapasowe, po tym jak potwierdzono aktywność obu wersji enzymu w reakcji utleniania benzaldehydu. Przeprowadzono również testy stabilności ekstraktów zamrożonych w  $-20^\circ\text{C}$  w warunkach tlenowych. Badania te wykazały niestety szybką inaktywację enzymu przechowywanego w takich warunkach.

Ponieważ projekt uzyskał finansowanie dopiero w połowie roku 2024 główne działania koncentrowały się wokół organizacji grupy badawczej i zakupu niezbędnego sprzętu. Zorganizowano kampanię informacyjną dotyczącą rekrutacji na stanowiska doktoranckie w czasie letnich wakacji, ale niestety nie udało się zrekrutować kandydatów, którzy pozytywnie przeszliby weryfikację w czasie egzaminu do szkoły doktorskiej. Nową rekrutację uzupełniającą otwarto w listopadzie 2024. Zakończy się ona egzaminem w styczniu 2025. Udało się natomiast zainicjować kooperacji z AGH, w ramach której prowadzony będzie wspólny projekt magisterskich. Udało się też zrekrutować studenta, który będzie te badania realizował.

W ramach projektu przeprowadzono również dwie procedury zakupowe. Zakupiono i zainstalowano termostat do komory rękawicowej, co umożliwi chłodzenie próbek w warunkach beztlenowych. Ponadto przeprowadzono dwa postępowania przetargowe na aparaturę LC-MS. Rozstrzygnięcie drugiego przetargu uprawomocni się z końcem grudnia 2024. Na koniec należy wspomnieć o podpisaniu umowy dotyczącej transferu systemów do rekombinowanej produkcji enzymów z Uniwersytetu w Amsterdamie. Genetycznie zmodyfikowane bakterie będą produkować enzymy, które w połączeniu z AOR powinny umożliwić syntezę amin.

Wyniki wstępnych badań do projektu zostały zaprezentowane na drugim ESAB Congress oraz w formie oferty otwartej innowacji na Life Science Open Space w Krakowie. Oba wydarzenia miały miejsce w listopadzie 2024.

## 14. System biochemiczny mikrośrodowiska trichomów wydzielniczych, jego właściwości biokatalityczne i potencjał w biotechnologii

Projekt badawczy „OPUS” NCN nr- 2023/49/B/NZ1/02898 [2024-2028]

(kierownik projektu: prof. dr hab. Maciej Szaleniec, projekt koordynowany przez: dr inż. Paweł Aleksander Rodziewicz, IFR PAN)

Roślinne włoski gruczołowe to naskórkowe wyrostki roślinne specjalizujące się w produkcji, wydzielaniu i przechowywaniu szerokiej gamy metabolitów wtórnych. Wiele z tych związków ma silne właściwości biologiczne i jest stosowanych jako substancje zapachowe, barwniki, środki wzrostu roślin, środki zapachowe, pestycydy i przede wszystkim farmaceutyki, np. kannabinoidy.

Celem projektu jest zbadanie mikrośrodowiska włosków gruczołowych z gatunków konopi i pomidorów na kilku poziomach organizacji komórkowej – metabolomiki, proteomiki i w pewnym stopniu transkryptomu. Na podstawie wcześniejszych badań założyliśmy, że wydzieliny włosków gruczołowych są funkcjonalną częścią maszyneryi włosków i tworzą bardzo specyficzny roztwór, który wspomaga katalizę enzymatyczną *ex vivo*. W projekcie planujemy zbadać właściwości biokatalityczne włosków gruczołowych i na podstawie uzyskanych wyników odtworzyć mikrośrodowisko włosków, opracować modele mikroemulsji zdolne do katalizy i zademonstrować reakcje biochemiczne, takie jak cyklizacja oksydacyjna, którą przedstawiliśmy już w naszych poprzednich badaniach, ale w bardzo podstawowym układzie.

Grant realizowany jest w kooperacji Instytutu Fizjologii Roślin PAN (lider) oraz Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN w ramach Międzyinstytutowego Laboratorium Biotechnologii i Katalizy Enzymatycznej. W roku 2024 badania prowadzone przez IKiFP PAN obejmowały charakterystykę trzech enzymów: THCAS (tetrahydrokannabinolowej syntazy kwasowej), CBDAS (syntazy kwasowej kannabidiolu) oraz CBCAS (syntazy kwasowej kannabichromenu). Enzymy te odgrywają kluczową rolę w biosyntezie kannabinoidów i posiadają wysoką specyficzność substratową. Sekwencje kodujące dla tych enzymów zostały zidentyfikowane i pobrane z zasobów UniProt oraz GenBank.

Geny kodujące enzymy zostały zamówione w zewnętrznej firmie biotechnologicznej i sklonowane do wektora pPICZalpha, który umożliwia sekrecję białek w systemie ekspresji *Pichia pastoris*. W ramach badań przeprowadzono propagację tych wektorów najpierw w komórkach *Escherichia coli*, a następnie w *Pichia pastoris*.

Na tym etapie badania zakończono na skutecznej transformacji wektorów z genami do gospodarza drożdżowego. Kolejne kroki badawcze będą obejmować przeprowadzenie badań przesiewowych mutantów w celu optymalizacji ekspresji i aktywności badanych enzymów.

## 15. 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 było 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 wobec cząsteczki  $N_2O$  i możliwości utworzenia reaktywnych form tlenu odpowiedzialnych za selektywne utlenianie w układach modelowych z  $N_2O$  (dwuatomowe centra TMI umieszczone w zeolitach mają zdolność do rozrywania wiązania N-O i tworzenia tlenu ana jednym z centów metalicznych); 2) wykonanie 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  $N_2O$  przez dwa odległe, współdziałające jony metali przejściowych (Fe, Mn, Ni, Co) wykorzystano model składający się z dwóch metaloporfiryn, które umieszczono równolegle względem siebie w różnych odległościach (6,0 – 4,0 Å). Cząsteczkę podtlenku azotu umieszczono pomiędzy dwoma centrami metalicznymi, równolegle do osi łączącej obydwa metale. Atomy wodoru obu porfiryn pozostały zamrożone, podczas gdy pozostałe atomy w cząsteczkach miały swobodę ruchu podczas prowadzonych optymalizacji. Obliczenia wykonano w ramach Teorii Funkcjonałów Gęstości przy użyciu oprogramowania Turbomole v6.3. Do obliczeń użyto baz funkcyjnych typu def2-TZVP oraz funkcyjałów PBE dla Ni, BP dla Co i Mn, B3LYP dla Fe. Do obliczenia elektronowych oddziaływań kulombowskich zastosowano metodę resolution of identity (RI), znaną również jako dopasowanie gęstości. Przeprowadzone badania nie wykazały zdolności układów dwuatomowych rozrywania wiązania N-O w cząsteczce tlenu azotu(I) w przypadku wszystkich badanych jonów ( $N_2O$  nie ulega aktywacji, wiązanie N-O praktycznie nie zmienia długości, a sama cząsteczka układa się równolegle do płaszczyzn Por), z wyjątkiem  $[Mn(Por)]_2$  (obserwowane jest rozerwanie N-O i utworzenie ugrupowania  $Mn(IV)=O$ , gdy odległość Mn-Mn wynosi 4 – 4,5 Å).

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. Zbadano aktywność badanych układów w reakcji niskotemperaturowego utleniającego odwodornienia lekkich alkanów. Porównano metalozeolity, w których występują centra bimetaliczne (obserwowana selektywność Mn-FER i Fe-FER do alkenów ~100% w 200 °C) z tymi, w których ze względu na strukturę pary jonów metali przejściowych nie występują (aktywne dopiero w temperaturze > 350 °C).

## 16.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*)

Celem projektu jest opracowanie strategii prewencji konserwatorskiej, która określi najdogodniejsze warunki przechowywania obiektów dziedzictwa kultury wykonanych ze zmiękczonego poli(chlorku winylu) - PVC, uwzględniając kwestie zarówno ekonomiczne, jak i ekologiczne. Badania prowadzone w ramach tego projektu skupiają się na śledzeniu procesu degradacji w temperaturach nieprzekraczających 80 °C poprzez obserwowanie zmian strukturalnych (chemicznych) zachodzących w PVC i ich skorelowanie ze zmianami we właściwościach mechanicznych materiału.

W trzecim roku trwania projektu skupiono się na migracji ortoftalanów najliczniej identyfikowanych w kolekcjach muzealnych zawierających obiekty z PVC. Przewaga dyfuzji wewnątrz obiektów lub emisji powierzchniowej (parowania), determinująca szybkość ogólnego procesu migracji plastyfikatora, stanowiła podstawę zrozumienia potencjalnego ryzyka emisji ortoftalanów oraz rozwoju naprężeń mechanicznych. Zgodnie z tą koncepcją zaproponowano ogólne korelacje energii aktywacji dyfuzji i parowania różnych ortoftalanów w zależności od ich masy molowej. Otrzymane zależności powstały przy wsparciu dynamiki molekularnej wykonanej we współpracy z prof. Tomaszem Pańczykiem z IKiFP PAN oraz dyfuzometrii NMR w cieple stałym wykonanej przez zespół z Centrum NanoBioMedycznego UAM w Poznaniu. Badania wykazały, że w przypadku większości obiektów z PVC ryzyko przyspieszonej migracji po łagodnym usunięciu powierzchniowej warstwy plastyfikatora jest niskie, a zatem czyszczenie powierzchni pozwoliłoby na zmniejszenie osadzania się pyłu i ograniczenie zanieczyszczenia powietrza przez obiekty emitujące ortoftalany w środowisku muzealnym.

Mając na uwadze potrzebę szybkich rozwiązań wspierających podejmowanie decyzji w zakresie ochrony zbiorów, zaproponowano również protokół składający się z nieniszczącej analizy jakościowej i ilościowej plastyfikatorów w obiektach wykonanych ze zmiękczonego PVC (spektroskopia w podczerwieni lub Ramana), określenia stanu fizycznego badanych obiektów oraz oceny procesu wpływającego na szybkość migracji plastyfikatora.

Zakończono budowę modelu mechanicznego w oprogramowaniu COMSOL Multiphysics® dla reprezentatywnego dla zbiorów obiektu dmuchanego wykonanego z folii PVC o grubości od 0.2 do 2 mm w oparciu o parametry materiałowe wyznaczone w testach statycznych i dynamicznych. Na podstawie otrzymanego modelu określono maksymalny poziom naprężeń mechanicznych – 5 MPa – generowany w obiektach dmuchanych w trakcie ich przechowywania (w stanie nienadmuchanym). Przeprowadzono również eksperymenty pełzania mające na celu określenie odkształceń materiału pod wpływem stałego naprężenia długotrwale działającego na przechowywane obiekty. Otrzymane wyniki wykazały, że stałe naprężenie o wartości 5 MPa powoduje ok. 10 razy mniejsze odkształcenie względem granicy plastyczności, tj. nieodwracalnego odkształcenia. Oznacza to, że ryzyko powstawania uszkodzeń mechanicznych (trwałych deformacji) w przypadku dmuchanych obiektów z folii PVC jest znikome.

Wyniki badań uzyskanych w ciągu trzeciego roku trwania projektu były prezentowane na krajowych i zagranicznych konferencjach (12 wystąpień), a także stanowiły podstawę do przygotowania pięciu publikacji (jedna opublikowana, cztery w procesie recenzji). Projekt zwieńczyły wytyczne z zakresu prewencji konserwatorskiej dla obiektów sztuki współczesnej wykonanych lub zawierających elementy ze zmiękczonego PVC.

## **Projekty badawcze NCN „Sonatina”**



## **1. Multifunkcjonalne kompozytowe powłoki chitozanowe dla biodegradowalnych stopów Mg**

Projekt badawczy „SONATINA” NCN nr 2021/40/C/ST5/00266 [2021-2025]

(kierownik projektu: dr Dzmitry Kharytonau)

Stopy magnezu są szeroko badane pod kątem ich wykorzystania w tymczasowych medycznych materiałach biodegradowalnych. Pomimo wielu 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 trzecie i czwarte zadania projektu:

Zadanie 3. Analiza właściwości mechanicznych powłok.

W ramach Zadania 3 kierownik projektu odbył 6-miesięczny międzynarodowy staż naukowy pod kierownictwem 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) zbadane zostały właściwości nanomechaniczne powłok chitozanowych wybranych w zadaniach 1 i 2.

Zadanie 4. Ocena odporności na korozję i właściwości antybakteryjne powłok chitozanowych, oraz kompozytów opartych na chitozanie.

W ramach tego zadania wybrane powłoki chitozanowe i kompozytowe powłoki oparte na chitozanie osadzone na powierzchni stopów Mg i skoordynowane z jonami fosforanowymi i molibdenianowymi są obecnie badane pod kątem ich krótkoterminowego i długoterminowego zachowania korozyjnego w roztworze Hanka.

Dodatkowo przeprowadzono szczegółowe badania właściwości korozyjnych stopów AZ31 i WE43 w roztworze Hanka zawierającym molibdenian sodu jako inhibitor korozji. Zaproponowano narzędzie oparte na wieloczęstotliwościowej metodzie pomiaru impedancji do monitorowania mechanizmów korozji tych stopów i skuteczności przeciwkorozyjnego działania inhibitora.

## 2. Wytwarzanie nowej generacji trójwymiarowych materiałów ‘drug-on-chip’ o kontrolowanym uwalnianiu substancji aktywnych dedykowanych medycynie spersonalizowanej

Projekt badawczy „SONATINA” NCN nr 2024/52/C/ST8/00148 [2024-2027]

(kierownik projektu: dr inż. Wiktoria Tomal)

Stosowanie klasycznych sposobów dostarczania leków przysparza sporo kłopotów i ograniczeń związanych m.in. z małą aktywnością leku w miejscu docelowym, czy negatywnym wpływem na zdrowe obszary organizmu. Wychodząc na przeciw tym wyzwaniom naukowcy od lat opracowują nośniki substancji aktywnej w postaci nanocząstek czy nanokapsulek, które zrewolucjonizowały podejście do terapii lekowej. Jednak coraz większy popyt na bardziej precyzyjne i kontrolowane systemy dostarczania leku sprawiły, że zastosowanie samych nanonośników leków jest już niewystarczające, np. w przypadku dostarczania leków immunosupresyjnych. Ponadto, szereg dodatkowych wymagań takich jak: dokładne kontrolowanie profilu uwalniania leku w organizmie, zwiększenie skuteczności stosowania leków hydrofobowych, docelowe dostarczanie leków czy przedłużone ich uwalnianie sprawiają, że wciąż poszukiwane są nowe rozwiązania spełniające wymienione wymagania.

Biorąc pod uwagę możliwości jakie daje połączenie nanotechnologii z nowoczesnymi technikami druku 3D opracowany został plan badawczy pozwalający na syntezę i modyfikację polielektrolitowych nanonośników leków, ich implementację w procesach druku 3D, a w konsekwencji otrzymanie funkcjonalnych materiałów mogących kontrolować uwalnianie leku. W związku z powyższym, głównym celem projektu jest **opracowanie metod otrzymywania nowej generacji, trójwymiarowych materiałów „drug-on-chip” kontrolowanie uwalniających substancje aktywne, dedykowanych medycynie spersonalizowanej.**

W ramach realizacji niniejszego projektu zaplanowano pięć zadań badawczych:

|            |                                                                                                                             |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Zadanie 1: | Synteza polielektrolitowych nanonośników substancji aktywnej;                                                               |
| Zadanie 2: | Wyznaczenie parametrów podstawowych otrzymanych nanokapsulek polielektrolitowych;                                           |
| Zadanie 3: | Opracowanie światłoczułej nano-żywicy do druku 3D zawierającej nanonośniki substancji aktywnej;                             |
| Zadanie 4: | Druk 3D materiałów hydrożelowych o zdefiniowanej geometrii zawierających polielektrolitowe nanonośniki substancji aktywnej; |
| Zadanie 5: | Analiza właściwości otrzymanych materiałów                                                                                  |

Zaproponowany projekt badawczy jest odpowiedzią na wyłonioną lukę badawczą, jaką jest brak rozwiązań pozwalających na otrzymywanie materiałów hydrożelowych zawierających nanonośniki polimerowe w postaci nanokapsulek polielektrolitowych przy wykorzystaniu techniki druku 3D-VAT. W roku 2024 przeprowadzono badania wstępne, polegające na otrzymaniu testowego, trójwymiarowego wydruku, zawierającego nanokapsułki z zamkniętą wewnątrz substancją aktywną. W tym celu w pierwszej kolejności podjęto się syntezy kapsulek funkcjonalizowanych Rodaminą B metodą *layer-by-layer*. W wyniku syntezy z użyciem polielektrolitów PAH i PSS otrzymano 3 warstwowe nanokapsułki polielektrolitowe naładowane dodatnio, o średnim rozmiarze 52 nm i potencjale zeta 44 mV, które tworzyły stabilną dyspersję w roztworze 0.015M NaCl. Następnie, na podstawie przeprowadzonych doświadczeń wybrano żywicę podstawową: PEGDA z fotoinicjatorem TPO-Li (1% wag.). Układ ten charakteryzuje się krótkim czasem indukcji (<1 s) oraz wysokim stopniem konwersji monomeru (~100%), co jest wskazane w przypadku zastosowania takiej żywicy w procesach druku 3D. W kolejnym etapie przystąpiono do przygotowania światoczułych żywicy do druku 3D-VAT zawierające zsintezowane wcześniej nanokapsułki wraz z powyższą żywicą oraz przeprowadzono druk 3D czterech zaprojektowanych modeli: 3 modeli wolumetrycznych o różnej geometrii oraz jeden model prostopadłościanu, który posłużył do analizy mikroskopowej.

### 3. Rozszyfrowanie niewiadomej- struktura i funkcja białka Nif3

Projekt badawczy „SONATINA” NCN nr 2024/52/C/NZ1/00271 [2024-2027]

(kierownik projektu: dr inż. Elżbieta Wątor)

Białko Nif3 zostało określone jako jedno z najbardziej konserwatywnych, a jednocześnie najmniej poznanych białek wśród Eukariontów. Pomimo licznych badań nad jego prokariotycznymi homologami, funkcja eukariotycznego Nif3, w tym ludzkiego Nif3L1, pozostaje niejasna. Istnieją przesłanki, że białko to może być zaangażowane w różnorodne procesy biologiczne, takie jak naprawa DNA, metylacja, gospodarka żelazem, odpowiedź na stres komórkowy, a także może mieć związek z chorobami takimi jak nowotwory, osteoporoza czy schorzenia neurologiczne. Jednak dotychczasowe dane są niespecyficzne i niewystarczające do wyciągnięcia jednoznacznych wniosków.

Celem niniejszego projektu jest wypełnienie tej luki w wiedzy poprzez zastosowanie zintegrowanego podejścia obejmującego biologię strukturalną, komórkową, proteomikę oraz transkryptomikę. Główne założenie badawcze zakłada, że Nif3L1 może uczestniczyć w metabolizmie poliamin, w tym w procesie hypuzynacji czynnika translacyjnego eIF5A. Projekt łączy badania ukierunkowane, oparte na konkretnych hipotezach, z badaniami eksploracyjnymi, mającymi na celu odkrycie nowych funkcji białka.

Projekt oficjalnie rozpoczął się na początku września 2024 roku, jednak rzeczywista realizacja rozpoczęła się 15 października 2024 roku wraz z zatrudnieniem kierownika projektu. W związku z krótkim okresem trwania projektu w 2024 roku (2,5 miesiąca), działania skupiały się głównie na przygotowaniu zaplecza eksperymentalnego oraz rozpoczęciu prac wstępnych.

W ramach dotychczasowej realizacji projektu wykonano następujące działania.

- **Zakup sprzętu i odczynników** – zrealizowano zamówienia niezbędnego sprzętu komputerowego oraz odczynników do prowadzenia eksperymentów laboratoryjnych.
- **Projektowanie konstruktów ekspresyjnych** – przy użyciu metod bioinformatycznych zaprojektowano konstrukty do produkcji rekombinowanych białek w systemie bakteryjnym.
- **Optymalizacja produkcji i oczyszczania białek** – przeprowadzono pierwsze testy ekspresji i oczyszczania białek, które będą wykorzystywane w dalszych etapach badań strukturalnych i funkcjonalnych.
- **Optymalizacja krystalizacji białka Nif3** – wykonano wstępne eksperymenty krystalizacyjne z użyciem białka Nif3 z *Schizosaccharomyces pombe*. Uzyskane preparaty posłużą do dalszych analiz w ramach kampanii fragment screeningu podczas stażu zagranicznego w Lund (Szwecja).
- **Przegląd literaturowy** – przeprowadzono dogłębną analizę dostępnych danych naukowych dotyczących białka Nif3 i jego potencjalnych funkcji, co pozwoliło na doprecyzowanie kierunku dalszych badań.



## **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)

Dostępne dane literaturowe wskazują, że wiele typów nanocząstek metali i tlenków metali odgrywa kluczową rolę w procesach fibrylizacji białek, które z kolei są mocno związane z chorobami neurodegeneracyjnymi. Najnowsze raporty literaturowe wskazują, że aktywność nanocząstek w procesach fibrylizacji jest ściśle związana z ich właściwościami fizykochemicznymi. Wydaje się, że dominujący wpływ ma wielkość nanocząstek oraz ich właściwości powierzchniowe wynikające ze struktury chemicznej warstwy stabilizującej. Stawiana hipoteza zakłada, że modyfikacja powierzchni nanocząstek niskocząsteczkowymi substancjami o właściwościach antyfibrylarnych doprowadzi do otrzymania układów, które będą silniej hamować fibrylizację białek niż wolne nanocząstki i wybrane inhibitory.

W sprawozdawanym okresie prace objęły: 1) opracowanie metod syntezy nanocząstek tlenku tytanu ( $\text{TiO}_2\text{NPs}$ ), tlenku cynku ( $\text{ZnO}$ ) i tlenku żelaza ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) charakteryzujących się zbliżoną morfologią oraz rozkładem wielkości oraz 2) opracowanie efektywnych metod funkcjonalizacji powierzchni ww. nanocząstek za pomocą kwasu galusowego (GA) oraz kwasu rozmarynowego (RA). Ponadto, celem zaplanowanych badań było przeprowadzenie charakterystyki fizykochemicznej niemodyfikowanych oraz funkcjonalizowanych polifenolami nanocząstek.

Nanocząstki tlenków metali syntezowano metodami chemicznymi będącymi kombinacją procesów hydrolizy i kondensacji (metoda zol-żel), metod strąceniowych i współstrąceniowych, a także procesu kalcynacji. Optymalizowano takie parametry jak: stężenia reagentów, pH, siłę jonową, temperaturę, szybkość mieszania oraz warunki kalcynacji. W ramach przeprowadzonych prac udało się otrzymać quasi-sferyczne nanocząstki tlenków metali o wielkościach w zakresie od 5 do 100 nm. Ponadto, obrazowanie nanocząstek przy użyciu transmisyjnej mikroskopii elektronowej (TEM) dostarczyło informacji na temat rozkładu wielkości, wielkości średniej i polidispersyjności otrzymanych układów. Dla każdego typu nanocząstek przeprowadzono badania z użyciem spektroskopii fotoelektronów w zakresie promieniowania X (XPS), rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej (XRD) oraz termogravimetrii (TGA). Za pomocą techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS) wyznaczono zakresy stabilności nanocząstek zdyspergowanych w wodnych roztworach elektrolitów o kontrolowanym pH i sile jonowej. Dzięki pomiarom przeprowadzonym przy użyciu techniki elektroforetycznego światła (ELS) określono właściwości elektrokinetyczne nanocząstek (m.in. ruchliwości elektroforetyczne, potencjały zeta, punkty izoelektryczne).

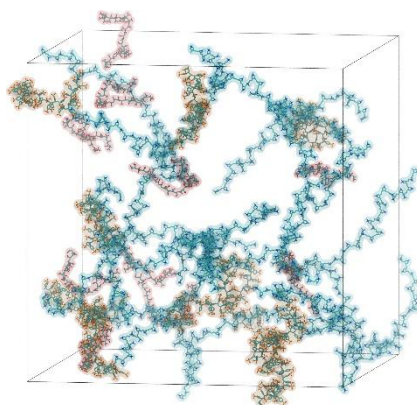
Funkcjonalizację nanocząstek tlenków metali kwasem galusowym oraz rozmarynowym przeprowadzono w oparciu o: 1) procesy elektrostatycznej adsorpcji polifenoli na powierzchniach nanocząstek metali i tlenków metali oraz 2) podczas reakcji chemicznej (estryfikacji) między polifenolami, a grupami hydroksylowymi powierzchni nanocząstek tlenków metali. Charakterystyka nanocząstek przeprowadzona z użyciem spektroskopii osłabionego całkowitego odbicia w podczerwieni (ATR-IR) wykazała efektywność procesu funkcjonalizacji i otrzymanie nanocząstek tlenków metali zmodyfikowanych powierzchniowo kwasem galusowym lub rozmarynowym. Badania elektrokinetyczne wykazały, że funkcjonalizowane nanocząstki, w odróżnieniu od niemodyfikowanych, nie posiadały punktów izoelektrycznych i w całym badany zakresie pH (3-11) charakteryzowały się ujemnym potencjałem zeta, którego wartość zależała od siły jonowej. Na podstawie zarejestrowanych dyfraktogramów XRD wykazano, że funkcjonalizacja nie wpłynęła na strukturę krystaliczną tlenków oraz na wielkość średnią nanokrystalitów.

## 2. Precyzyjne dostrajanie właściwości kompleksów polielektrolitów poprzez trójskładnikową kompozycję

Projekt badawczy „PRELUDIUM BIS” NCN 2023/50/O/ST5/00249 [2024-2028]

(kierownik projektu: dr hab. inż. Piotr Batys, prof. IKiFP PAN)

Przygotowano pliki symulacyjne do obliczeń trójskładnikowych układów polielektrolitów metodą dynamiki molekularnej. Jako modelowy dodatnio naładowany polielektrolit wybrano poli(chlorek diallilodimetyloamoniowy (PDADMA). Natomiast modelowymi ujemnie naładowanymi polielektrolitami były poli(kwas akrylowy) (PAA) oraz poli(4-styrenosulfonian sodu) (PSS). Przygotowano pliki wejściowe dla mieszanin PDADMA<sub>1</sub>-PSS<sub>1-x</sub>-PAA<sub>x</sub>, dla  $x = 0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$ . Ponadto, każdy z powyższych układów przygotowany został w trzech różnych stężeniach NaCl, tj. 0M, 0.5M, 1.0M. Wszystkie układy zostały zrównoważone a symulacje są w trakcie obliczeń na superkomputerze. Przykładowa początkowa konfiguracja została pokazana na Rys. 1.



Rysunek 1. Początkowa konfiguracja dla układu PDADMA<sub>1</sub>-PSS<sub>0.5</sub>-PAA<sub>0.5</sub>. Częsteczki PDADMA, PSS oraz PAA oznaczone są odpowiednio kolorami niebieskim, pomarańczowym oraz czerwonym.

## **Projekty badawcze NCN „Preludium”**



## 1. Analiza wpływu wybranych czynników na zmiany struktury $\alpha$ -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)

Badania zaplanowane w ramach projektu stanowią kluczowy krok w kierunku kontroli konformacji cząsteczek białek oraz struktury filmów białkowych na powierzchni adsorpcyjnej. Ma to ogromne znaczenie dla wyjaśnienia procesów prowadzących do powstawania nieprawidłowych struktury białkowych charakterystycznych dla rozwoju chorób neurodegeneracyjnych, takich jak np. choroba Parkinsona. Choroba Parkinsona 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  $\alpha$ -synukleinę, które występuje w nieprawidłowo sfałdowanych formach i może być przyczyną śmierci neuronów. Kontroli procesu zmian konformacyjnych białek stanowi kluczowy krok w rozwoju innowacyjnych terapii, opracowywaniu strategii zapobiegania tego typu chorobom oraz projektowaniu nowoczesnych narzędzi diagnostycznych, które umożliwiają szybką i precyzyjną detekcję chorób na ich wczesnym etapie.

Wykorzystując kilka zaawansowanych metod eksperymentalnych, monitorowano in situ transformacje białek monomerycznych w agregaty białkowe w fazie roztworu i na powierzchniach międzyfazowych, imitując agregację białek w komórkach i tkankach. Zastosowanie skoordynowanego podejścia metodologicznego, w tym wykorzystanie mikrowagi kwarcowej (QCM-D), rezonansu plazmonów powierzchniowych (MP-SPR) i spektroskopii w podczerwieni (IR) pozwala zrozumieć przebieg procesu biochemicznego na poziomie submolekularnym. Widma dichroizmu kołowego (CD) i spektroskopii w podczerwieni (IR) potwierdziły, że oddziaływanie białka z powierzchnią złota powoduje zmiany w jego konformacji, kierunku i intensywności zmian strukturalnych, które zależą od pH środowiska, w którym przeprowadzono adsorpcję. Uzupełniające eksperymenty z wykorzystaniem MP-SPR i QCM-D wykazały, że warunki adsorpcji i struktura cząsteczek mają istotniejszy wpływ na hydratację powstałych filmów niż stopień pokrycia ich powierzchni. Przeprowadzone badania miały na celu określenie wpływu oddziaływań molekularnych na stabilność wewnętrznie nieuporządkowanego białka na granicy faz. Istotne było zidentyfikowanie mechanizmu zmian zachodzących w strukturze białka, prowadzących w etapie końcowym do powstawania toksycznych agregatów i włókien amyloidowych.

## 2. Opracowanie racjonalnych wytycznych środowiskowych na potrzeby krótkotrwałych 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)

Zakończono prace projektowe nad opracowaniem racjonalnych, opartych na wynikach badań, wytycznych dotyczących kontroli klimatu we wnętrzach zabytkowych, mających pozwolić kustoszom i właścicielom podobnych budynków podejmować decyzje przyczyniające się do ochrony pozostającego pod ich opieką dziedzictwa kultury, stanowiącego w głównej mierze przez masywne obiekty drewniane, tj. rzeźby i elementy dekoracyjne.

Poddano analizie wyniki dwóch eksperymentów prowadzonych metodą emisji akustycznej, mających posłużyć do walidacji dwuwymiarowego modelu masywnego elementu drewnianego. Pierwszy eksperyment polegał na poddaniu naciętych dysków drewna lipowego skokowej zmianie RH w komorze klimatycznej. Drugi eksperyment opierał się na monitoringu stanu zachowania rzeźby św. Sebastiana eksponowanej w gablocie na wystawie czasowej w Zamku Królewskim na Wawelu. Na skutek analizy zrezygnowano z wykorzystania wyników eksperymentalnych do walidacji modelu, gdyż warunki pierwszego z eksperymentów odbiegały od warunków mikroklimatycznych reprezentatywnych dla historycznych wnętrz zabytkowych (w szczególności RH w zakresie 20-80%), natomiast w drugim z eksperymentów, z przyczyn logistycznych dot. budowy wystawy, interwał pomiędzy przeniesieniem rzeźby ze Skarbca Bazyliki Mariackiej a zainstalowaniem układu pomiarowego okazał się zbyt duży, by zarejestrować istotny sygnał związany ze zmianą RH pomiędzy instytucjami.

Przy pomocy modelu numerycznego przeanalizowano wpływ następujących scenariuszy wahań mikroklimatu w Bazyliki Mariackiej (BM) w Krakowie:

- Ogrzewanie wnętrza kościoła w okresie zimowym do określonego stałego poziomu temperatury w momentach spadku poniżej tej wartości;
- Ogrzewanie wnętrza kościoła do temperatury komfortu cieplnego ( $T=18^{\circ}\text{C}$ ) na czas krótkotrwałych wydarzeń religijnych, komercyjnych, itp.
- Przeniesienie rzeźby z wnętrza kościoła do studia konserwatorskiego o utrzymywanym klimacie uznawanym za optymalny dla dzieł sztuki ( $T=21^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{RH}=50\%$ ).

Analiza każdego ze scenariuszy a)-c) polegała na obliczeniu wartości szybkości uwalniania energii,  $G$ , w funkcji czasu trwania zmiany mikroklimatu i porównaniu jej z krytyczną wartością szybkości uwalniania energii,  $G_{lc}$ , będącej wartością progową dla rozwoju głębokości pęknięcia. Rozważano szeroki zakres początkowych głębokości pęknięcia. Określono, że:

- Najwyższą temperaturą, do której można ogrzewać wnętrze BM w okresie zimowym nie powodując podwyższenia ryzyka zniszczenia dla rzeźb ołtarza jest  $T=11^{\circ}\text{C}$ .
- Ogrzewanie BM do temperatury komfortu cieplnego na czas krótkotrwałych wydarzeń, wywołujące spadek do  $\text{RH}=20\%$  może trwać do 12 godzin bez wywołania ryzyka pęknięcia rzeźb.
- Przeniesienie rzeźby z kościoła do studia konserwatorskiego o utrzymywanym klimacie uznawanym za optymalny dla dzieł sztuki ( $T=21^{\circ}\text{C}$ ,  $\text{RH}=50\%$ ) na czas konserwacji powinno nastąpić po świadomej analizie ryzyka, gdyż przy długotrwałej zmianie warunków (9 miesięcy) zmiana nawet z poziomu  $\text{RH}=59\%$  do  $53\%$  może wywołać przyrost głębokości pęknięć.

Projekt zakończył się publikacją wytycznych dot. kontroli klimatu w budynkach zabytkowych i kościołach artykułu naukowego w Heritage Science: Soboń and Bratasz, Risk of fracture in massive cultural objects made of lime wood: a case study of Veit Stoss' altarpiece, Heritage Science (2024) 12:214

### **3. 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: prof. dr hab. Jan Zawala)

W ramach projektu, dla wytypowanych układów nanomateriałów magneto-reaktywnych oraz surfaktantu aminokwasowego C12-ARG, przeprowadzono testy właściwości spieniających oraz stabilizujących pianę. Uzyskane wyniki wykazują silną korelację z wcześniejszymi danymi dotyczącymi efektów powierzchniowych, obserwowanych w pomiarach napięcia powierzchniowego, spektroskopii SFG oraz badaniach stabilności filmów pianowych. Otrzymane dane potwierdzają założenie, że synergistyczne właściwości stabilizujące pianę osiągane są w układach o przeciwnym ładunku. W dalszym etapie badań zbadano również właściwości spieniające czystego surfaktantu oraz jego mieszanin z nanomateriałami w wybranych zakresach pH, z wykorzystaniem metody dynamicznej analizy piany. Eksperymenty wykazały, że dodatek cząstek o przeciwnym ładunku względem surfaktantu w danym pH prowadzi do zwiększonej spienialności oraz wyższej stabilności piany w określonych warunkach. W kolejnych etapach planowane są testy tych układów w obecności pola magnetycznego, z wykorzystaniem nowo opracowanego stanowiska pomiarowego do analizy właściwości stabilizujących pianę w polu magnetycznym.



## **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 [2020-2024]  
(kierownik projektu: prof. dr hab. Maciej Szaleniec)

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.

Projekt zakończył się w pierwszym kwartale roku 2024. W ostatnich miesiącach jego realizacji dokonano podsumowania przeprowadzonych pomiarów i obliczeń oraz przygotowano publikację opisującą wyniki badań.

W szczególności wyprowadzono równania kinetyczne opisujące reakcję enzymatyczną, co pozwoliło na porównanie eksperymentu z obliczeniami QM:MM, które zostały przeprowadzone w poprzednich latach projektu. Wykazano, że model mikrokinetyczny bazujący na obliczeniach poprawnie przewiduje enancjoselektywność reakcji - szybkość reakcji prowadzącej do produktu w konfiguracji *R* jest 5766 razy większa od tej prowadzącej do *S*-benzylobursztynianu. Podobna analiza pozwoliła na poprawne przewidzenie kinetycznego efektu izotopowego (przewidywana wartość KIE wyniosła 2.7 względem wartości eksperymentalnej - 2.1).

Wyprowadzono i opisano również 3 mechanizmy wymiany izotopowej w D<sub>2</sub>O i na podstawie analizy kinetycznej wskazano mechanizm prowadzący do powstania d<sup>1</sup>-benzylobursztynianu oraz do d<sup>2</sup>-benzylobursztynianu (Fig. 1). Analizy kinetyczne oparto również na wartościach barier uzyskanych z obliczeń QM:MM oraz analizie mikrokinetycznej. Dzięki zastosowaniu tego podejścia udało się również oszacować szybkość wymiany izotopowej H/D na cysteinie w centrum aktywnym (w oparciu o stosunek ilościowy obserwowanych w eksperymencie produktów). Wyniki tych analiz opisano w artykule, który został zdeponowany na serwerze bioRxiv.

Na koniec opisano metodologię transformacji genetycznej *Aromatoleum evansii* w celu produkcji rekombinowanej BSS w metodologicznym rozdziale serii Methods in Enzymology. Tekst rozdziału jest obecnie w recenzji.

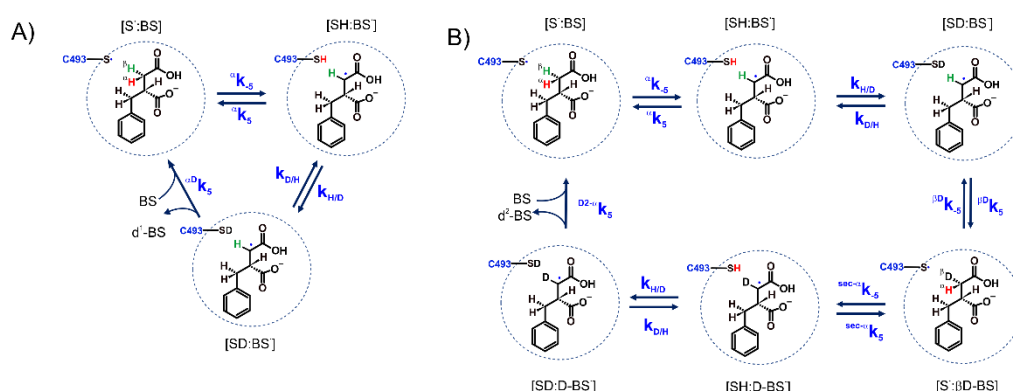


Fig. 1. Mechanizmy wymiany H/D prowadzące do A) d<sup>1</sup>-benzylobursztynianu, B) d<sup>2</sup>-benzylobursztynianu



## **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 [2020-2024]  
(kierownik projektu: dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP PAN)

Celem badań prowadzonych w ramach niniejszego projektu było zaproponowanie testowanych przez partnerów zagranicznych projektu modeli układów fotokatalitycznych i zbadanie ich struktury elektronowej oraz określenie mechanizmu sprzęgania metanu do etanu na wybranych układach.

W badaniach teoretycznych rozważono możliwość aktywacji wiązania C-H w metanie pod wpływem tzw. reaktywnych form tlenu (ROS) –  $\cdot\text{OH}$ ,  $\cdot\text{OOH}$ ,  $^1\text{O}_2$ , które tworzą się w obecności fotokatalizatorów, z powierzchniowych cząsteczek znajdujących się w środowisku reakcji (głównie  $\text{O}_2$  i  $\text{H}_2\text{O}$ ). Przeprowadzone badania (MP2/6-31g\*) wskazują na istotność tej ścieżki aktywacji metanu w warunkach fotokatalitycznych: wyliczona bariera energetyczna reakcji rozerwania wiązania C-H w metanie wynosi 15,4 kcal/mol w przypadku reakcji z  $\cdot\text{OH}$  oraz 19,8 kcal/mol oraz w reakcji z  $^1\text{O}_2$ . Reakcja z  $\cdot\text{OOH}$  nie jest korzystna (bariera aktywacji 73,8 kcal/mol). Stężenie ROS i ich stosunkowo krótkie czasy życia, powodują, że ścieżki reakcji z ROS są jedynie jedną z możliwości, nie wykluczając reakcji zachodzących na powierzchni fotokatalizatora.

Etap sprzęgania metanu zbadano z kolei na układach Ag-HPA-TiO<sub>2</sub> oraz Pd-HPA TiO<sub>2</sub>. Eksperymenty prowadzone równolegle do obliczeń teoretycznych wskazały, że w w/w układach rodniki metylowe powstają w dużej mierze w wyniku reakcji w fazie gazowej, w reakcji między metanem a rodnikami hydroksylowymi powstającymi z wody (będącej reagentem), w wyniku reakcji fotokatalitycznej. Przeprowadzone obliczenia pokazały, że  $\cdot\text{CH}_3$  wiąże się z powierzchnią fotokatalizatorów. Nanocząstki Pd i izolowane atomy Pd wiążą  $\cdot\text{CH}_3$  silniej niż jony srebra, natomiast energia potrzebna do utworzenia wiązania C-C jest mniejsza dla katalizatora Ag-HPA-TiO<sub>2</sub> (8,8 kcal/mol) niż Pd-HPA-TiO<sub>2</sub> (36,6 kcal/mol), czy też Pd-TiO<sub>2</sub> (29 kcal/mol).



## **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)

Rok 2024 był ostatnim rokiem realizacji projektu GRIEG Craquelure. Zespół badawczy skoncentrował się na zastosowaniu opracowanych modeli fizycznych 3D obrazów na płótnie i na desce z rozwiniętymi siatkami spękań w celu określenia bezpiecznych zakresów wahań wilgotności względnej.

W obrazach na desce powstawanie nowego pęknięcia w materiałach tworzących warstwę malarską jest spowodowane przeniesieniem naprężeń z podłoża na spękaną warstwę. Naprężenie w środku między dwoma pęknięciami modelowano jako funkcję wielkości obciążenia wywołanego przez zmiany wymiarowe warstw budujących obraz spowodowane zmianami wilgotności względnej. W przypadku obrazu na desce oszacowano stosunki odległości między pęknięciami w kierunkach stycznym i wzdłużnym deski do grubości warstwy malarskiej. Określono amplitudę wahań wilgotności względnej powodujących powstawanie nowych pęknięć. Zależy ona od grubości deski, kierunku anatomicznego drewna, jego gatunku, grubości warstw podłoża i farby oraz odległości między spękaniem. Wykazano, że dla znormalizowanej odległości między spękaniem wynoszącej ok. 3 nowe pęknięcia nie mogą powstać niezależnie od wielkości wahań wilgotności względnej.

Mechanizm powstawania pęknięć w obrazach na płótnie jest inny. Drewniany blejtram nakłada ograniczenie na reakcję płótna i warstwy podłoża generowanej przez zmiany wilgotności względnej. Zarówno w przypadku bardzo sztywnych, jak i bardzo elastycznych blejtramów ryzyko powstawania pęknięć jest bardzo niskie. Średnio sztywne ramy są najgorszym przypadkiem gdyż powodują największą koncentrację naprężeń w narożnikach. Wykazano, że ryzyko pęknięcia warstwy farby zależy głównie od poziomu wilgotności względnej, przy którym płótno zostało nabite na blejtram. Nie zaobserwowano pęknięć, jeśli płótno zostało nabite w wilg. wzgl. 50%, nawet przy spadku wilgotności względnej o 40%. Jeśli płótno zostało nabite w wilgotności 80%, to spadek o 32% powodował pęknięcie. Modelowanie wykazało, że podobnie jak w przypadku obrazów na deskach, pęknięcia w obrazach na płótnie znacznie zmniejszają ryzyko rozwoju dalszych pęknięć. Krytyczny stosunek odległości między pęknięciami w narożnikach znormalizowany do grubości warstwy podłoża odpowiadającej nasyceniu pęknięć zależy od grubości warstwy podłoża i został oszacowany na 25-50 dla grubości warstwy podłoża wynoszącej od 150 do 300 mikronów.

Wyniki projektu zostały wdrożone na platformie konserwacji zapobiegawczej HERIE ([herie.pl](http://herie.pl)). Modele ryzyka uszkodzenia mechanicznego w obrazach tablicowych zostały udoskonalone poprzez dodanie opcji wyboru przez użytkownika odległości między spękaniem. Oczywiście jest, że przy małych odległościach zmniejsza to ryzyko rozwoju spękań przez wahania wilgotności względnej.

Osiągnięcia projektu zostały zaprezentowane podczas zorganizowanego międzynarodowego sympozjum „Preventive conservation in heritage institutions” oraz na 4 warsztatach szkoleniowych „HERIE – platforma prewencji konserwatorskiej” zorganizowanych na Zamku Królewskim na Wawelu, Uniwersytecie Warszawskim i Uniwersytecie Mikołaja Kopernika.

## 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 Warszński*)

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 dostarczają substancję leczniczą i będą pełnić funkcję diagnostyczną.

Głównym celem projektu było 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 był 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 2024 roku projekt dobiegł końca. Opracowaliśmy nową strategię dostarczania leków o działaniu neuroprotekcyjnym (np. kwasu karnozowego) przy użyciu nanonośników, będących w stanie przekroczyć barierę krew-mózg. Ponadto, opracowane nanonośniki można lokalizować metodą rezonansu jądrowego (MRI) lub metodami optycznymi wykorzystując fluorescencję. Nanonośniki substancji neuroprotekcyjnych o emulsyjnym lub polimerowym rdzeniu zawierającym substancje czynne formowano metodą sekwencyjnej adsorpcji naładowanych polimerów funkcjonalizowanych czynnikami kontrastowymi dla fluorescencji lub MRI. Oprócz tego opracowane metodą syntezy nanocząstek o działaniu neuroprotekcyjnym,  $\text{CeO}_2/\text{Gd}$ , stabilizowanych PEG. Średni rozmiar opracowanych teranostycznych nanonośników wynosił ok. 150 nm i wykazywały stabilność w warunkach zbliżonych do fizjologicznych. Opracowane nanonośniki były dostarczone partnerom projektowym na badania w modelach *in vitro* oraz *in vivo* celem potwierdzenia ich właściwości neuroprotekcyjnych oraz zdolności pokonywania bariery krew/mózg. Wyniki uzyskane w projekcie dostarczyły cennych wniosków odnośnie dalszych ścieżek rozwoju nanonośników teranostycznych.

## **Projekty badawcze NCN „Miniatura”**



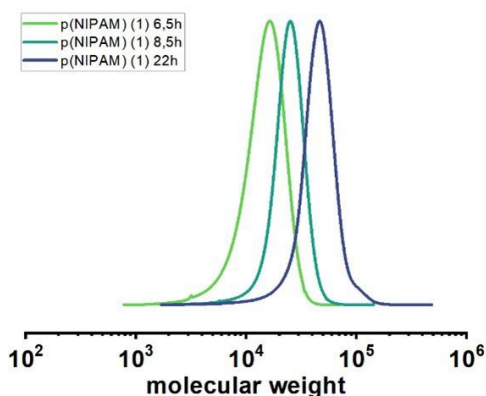
# 1. Termoczule emulsje wodno-wodne do zastosowań biomedycznych stabilizowane kopolimerami

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

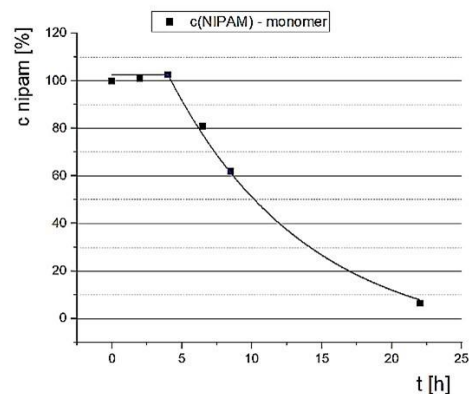
(kierownik projektu: dr inż. Andrzej Baliś)

Zoptymalizowano syntezę PNIPAM na drodze kontrolowanej polimeryzacji RAFT. Określono wpływ różnych czynników na kinetykę polimeryzacji, stopień konwersji monomeru oraz masę cząsteczkową. Poniżej przedstawiono rozkłady mas cząsteczkowych (dane z GPC) dla syntezy, gdzie odbierano frakcje co około 2h (Rys. 1.) oraz po prawej (Rys. 2.), kinetyka spadku stężenia monomeru (dane z  $^1\text{H-NMR}$ ) – świadcząca o wzroście łańcucha. Ciekawą obserwacją jest fakt, że polimeryzacja ruszyła dopiero po 4 godzinie. Być może pierwszy etap RAFT polegający na tworzeniu i propagacji rodników pochodzących od inicjatora (AIBN) nie powodował istotnego wzrostu makrocząsteczek, a dopiero drugi etap RAFT – po 4h, tworzenie rodników pochodzenia od CTA (Chain Transfer Agent) spowodował istotny wzrost makrocząsteczek. Wykazano, że praktycznie cały monomer spolimeryzował po 22h. Jego średnia masa cząsteczkowa  $M_n$  wyniosła 40kDa z przyzwoitą niską dyspersją  $M_w/M_n = 1.19$

Zbadano możliwość doczepiania drugiego bloku do otrzymanych oczyszczonych polimerów PNIPAM (hydrofilowego - MAA oraz hydrofobowego - SMA) – niestety bezskutecznie we wszystkich pięciu próbach (dane z GPC). Oczyszczone próbki charakteryzowano metodą TGA, w celu zbadania różnic w kształtach krzywych termicznej dekompozycji. Wszystkie próbki polimerów i kopolimerów notowały największą dynamikę spadku masy pomiędzy 350-450 °C i nie różniły się znacząco między sobą. W toku badań, wykorzystano próbkę pomyślnie zsyntezowanego bloku pierwszego (PNIPAM) do przetestowania układu do analizy rozpadu emulsji z kontrolą temperatury. Wykonano analizę separacji przykładowych emulsji PEG-DEX z dodatkiem 0.2 % polimeru PNIPAM oraz dla próbki takiej samej emulsji bez PNIPAM jako ślepej próby. Użycie PNIPAM bez bloku łańcuchów hydrofilowych/hydrofobowych nie wywołało założonego w celu działania naukowego - efektu spontanicznego tworzenia się emulsji powyżej LCST, a jedynie faza górna w której po rozpadzie emulsji znajdowało się 100% PNIPAMu zmieniła kolor z lekko mętnego na całkowicie biały, nie przepuszczający światła. Pośród pewnych sukcesów w realizacji grantu należy jednak wspomnieć o opracowaniu powtarzalnej syntezy bloku termoczułego metodą RAFT oraz charakterystyki otrzymanych emulsji na mikroskopii konfokalnej wybarwianej FastGreen/BLGnanogels oraz zmodernizowanie układu do badania rozpadu emulsji o moduł temperaturowy.



Rys. 1. Rozkłady mas cząsteczkowych wg GPC syntezy pierwszego bloku p(NIPAM)



Rys. 2. Badanie kinetyki syntezy bloku termoczułego (1H- NMR)

## 2. 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 projektu było zbadanie możliwości zastosowania mieszanin biopolielektrolitów i biosurfaktantów do formowania i stabilizacji filmów pianowych. Wybór układu polielektrolit/surfaktant (PE/S) był podyktowany właściwościami komponentów, ze szczególnym naciskiem na: biodegradowalność, aktywność biologiczną (antyseptyczną) i biokompatybilność. Stosując komplementarne techniki eksperymentalne pozwalające na badanie filmów pianowych w warunkach statycznych i dynamicznych, zbadane zostały efekty synergistyczne i antagonistyczne układów polielektrolit/surfaktant w odniesieniu do stabilności filmów pianowych.

W zaplanowanym działaniu naukowym zakładałem sprawdzenie wpływu szeregu mieszanin polielektrolit/surfaktant na stabilność wytwarzanych filmów pianowych. Jako polielektrolity wybrałem syntetyczne polipeptydy: (i) kationowe poli-L-lizynę (PLL) i poli-L-argininę (PARG) i (ii) anionowy kwas poli-L-glutaminowy (PGA). Jako drugi składnik systemów PE/S zostały wybrane dwa biosurfaktanty: kationowy lauroyloarginian etylu (LAE) o wysokiej czystości i umiarkowanie anionowy ramnolipid (RH), który jest mieszaniną homologów mono- i di-ramnolipidów.

Dzięki pomiarom napięcia powierzchniowego i czasów życia cienkich filmów pianowych w warunkach statycznych wykazałem że najbardziej optymalnym stężeniem polielektrolitów, zarówno PLL, PARG jak i PGA, jest 100 mg/L. Taki dodatek polielektrolitów do badanych surfaktantów charakteryzował się znacznym spadkiem napięcia powierzchniowego i pozwalał na uniknięcie efektów wytrącania drugiej fazy aż do stężenia  $1 \times 10^{-3}$  M dla LAE i 600 mg/L dla RH. Stężenia te były graniczne, co zaobserwowano nie tylko poprzez pojawienie się zmętnienia ale także poprzez znaczne skrócenie czasów życia cienkich filmów pianowych.

Jeszcze bardziej interesujące, ze względu na zbliżone do rzeczywistych warunków wytwarzania piany, są standardowe badania właściwości pianotwórczych badanych układów PE/S metodą DFA (dynamic foam analyzer). Dodatek PGA do LAE spowodował znaczną poprawę właściwości pianotwórczych układu. Natomiast w przypadku układów PLL/RH i PARG/RH, ten efekt jest znacznie mniejszy. Dla układu PGA/LAE mamy do czynienia z silnie kationowym surfaktantem, podczas gdy w układach PLL(PARG)/RH ramnolipidy wykazują słabe właściwości anionowe w pH neutralnym (5,8), co prowadzi do dużo słabszych oddziaływań z polipeptydem niż ma to miejsce dla mieszaniny PGA/LAE. Zmiana warunków pH z kwaśnego na zasadowe, pH 10, spowodowała poprawę stabilności pian ze względu na wzmocnienie charakteru anionowego RH, jednakże zmętnienie występowało przy dużo niższym stężeniu surfaktantu. Wyniki otrzymane w testach na pienienie zostały zinterpretowane w kontekście badań nad wyciekaniem cienkich filmów ciekłych w warunkach dynamicznych (dynamic fluid-film interferometry DFI). Zastosowanie metody interferometrycznej pozwoliło mi nie tylko na pomiary czasów wyciekania cienkich filmów ciekłych ale także na pomiary grubości tych filmów w funkcji czasu. Tak otrzymane kinetyki wyciekania zostały porównane z teoretycznymi krzywymi wyciekania opartymi o istniejące w literaturze modele teoretyczne. Należy dodać że czasy życia pian otrzymywanych w eksperymentach DFA dobrze korelują się z szybkościami wyciekania cienkich filmów pianowych zmierzonych metodą interferometryczną.

Działanie naukowe zostało zakończone w roku 2024 złożeniem raportu końcowego do Narodowego Centrum Nauki. Efektem pracy było opublikowanie dwóch artykułów naukowych w czasopismach naukowych: *MDPI Materials* i *ACS Langmuir*.

### **3. 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 sprawozdawczym 2024 kierownik projektu pomyślnie zrealizował wszystkie zaplanowane cele badawcze grantu Miniatura VII. Na podstawie przeprowadzonych badań, zostało przygotowane sprawozdanie końcowe o numerze 80525 i złożone w Narodowym Centrum Nauki (NCN).

Głównym odkryciem naukowym przeprowadzonych badań jest to, że zmiany mikrostrukturalne wywołane przez powierzchniową obróbkę mechaniczno-ścierną (SMAT) znacząco zmieniają zachowanie czystego magnezu w środowiskach korozyjnych, zwiększając jego reaktywność. Ta zwiększona reaktywność sprzyja szybkiemu tworzeniu się gęstej warstwy produktów korozji, która następnie chroni powierzchnię magnezu przed dalszą korozją. Zwiększona reaktywność substratów magnezowych znacząco wpływa również na chemię obróbki konwersyjnej, poprawiając morfologię i właściwości antykorozyjne warstw fosforanowych na ich powierzchniach. Uzyskane wyniki wskazują, że zmiany struktury powierzchni uzyskane dzięki SMAT ułatwiają tworzenie wyższej jakości warstw fosforanowych na magnezie.

#### 4. Opracowanie metodologii otrzymywania spienionego materiału hydrożelowego: opis procesów formowania i charakterystyka otrzymanych struktur

Projekt badawczy "Miniatura" NCN nr 2024/08/X/ST8/00054 [2024-2025]

(kierownik projektu: dr inż. Sonia Kudłacik-Kramarczyk)

Opracowano receptury spienionych hydrożeli na bazie Ecogel™, gliceryny, żelatyny oraz Tween 80. Eksperymenty obejmowały różne proporcje składników, szczególnie zmienną ilość Tween 80 w zakresie od 0% do 50% masy w stosunku do gliceryny. Proces formowania materiałów opierał się na intensywnym mieszaniu przy użyciu homogenizatora (8500 rpm, 5 min) w celu uzyskania jednorodnych struktur. Przeprowadzono analizę spektroskopową FT-IR, która ujawniła charakterystyczne pasma związane z obecnością grup funkcyjnych, takich jak grupy karbonylowe, metylenowe oraz estrowe. Wyniki te potwierdzają modyfikujący wpływ Tween 80 na strukturę chemiczną hydrożeli. Co istotne, analiza nie wykazała obecności pasm wskazujących na powstawanie potencjalnie toksycznych produktów ubocznych, co świadczy o bezpieczeństwie procesu syntezy pod względem chemicznym. Badania mikroskopowe wykazały, że wzrost stężenia Tween 80 zwiększa średnicę pęcherzyków powietrza w strukturze hydrożeli. Taka cecha może poprawiać właściwości aplikacyjne, takie jak rozsmarowywalność i absorpcja przez skórę. Materiały z większą zawartością Tween 80 wykazywały wyższe kąty zwilżania wodą, co wskazuje na ich bardziej hydrofobowy charakter. Analiza energii powierzchniowej potwierdziła przewagę komponentu dyspersyjnego w próbkach z Tween 80. Materiały zawierające Tween 80 wykazywały większą tendencję do uwalniania

wody do otoczenia, podczas gdy próbki bez Tween 80 efektywnie zatrzymywały wilgoć. Badania stabilności za pomocą systemu multiscan wykazały, że dodatek Tween 80 stabilizuje strukturę piany, co zmniejsza skłonność do separacji faz. Przechowywanie próbek przez 24 godziny w temperaturze 6°C dodatkowo poprawiło stabilność materiałów. Analiza modułów sprężystości i stratności wykazała, że większe stężenia Tween 80 zwiększają sztywność materiałów, co może sprzyjać ich stabilności w aplikacjach wymagających odporności na deformację. Dotychczasowe badania dowiodły, że wprowadzenie Tween 80 znacząco wpływa na właściwości fizykochemiczne spienionych hydrożeli, zwiększając ich stabilność, hydrofobowość oraz zdolność do interakcji z substancjami niepolarnymi. Wyniki te sugerują szerokie możliwości zastosowania opracowanych materiałów.

Figure 2. Compilation of FT-IR spectra of oleogel sample without Tween and with the highest content of this emulsifier (up) and compilation of FT-IR spectra of all test samples (down). The experiment was conducted in triplicate and the presented data represent a representative result from the measurements.

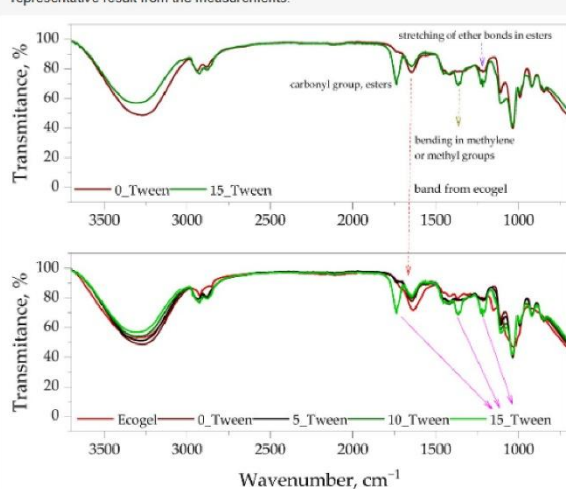


Figure 8. Results of the stability analysis of the oleogels directly after their synthesis (30 min measurement). The experiment was conducted in triplicate and the presented data represent a representative result from the measurements.

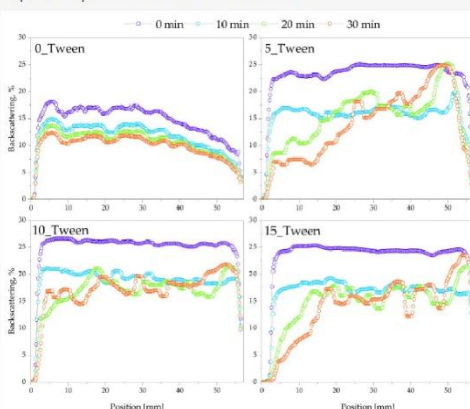
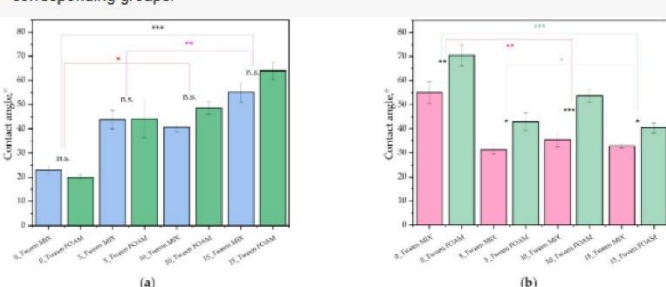


Figure 4. Contact angles of oleogel samples (both mixtures and foams). Panel (a) represents measurements for water and panel (b) represents measurements for diiodomethane. Error bars represent standard deviations ( $n = 3$ ). Statistical significance ( $p$ -values) between MIX and FOAM for each concentration is indicated above the bars (n.s. = not significant, \*  $p < 0.05$ , \*\*  $p < 0.01$ , for \*\*\*  $p < 0.001$ ). Significant differences between concentrations (Tukey's HSD) are marked with asterisks above the corresponding groups.



## **Projekty badawcze NCN „Polonez Bis”**



# 1. Proste metody syntezy przyszłych, niekonwencjonalnych materiałów plazmonicznych posiadające centra monoatomowe i bimetaliczne dla zrównoważonych procesów wytwarzania H<sub>2</sub> i redukcji CO<sub>2</sub>



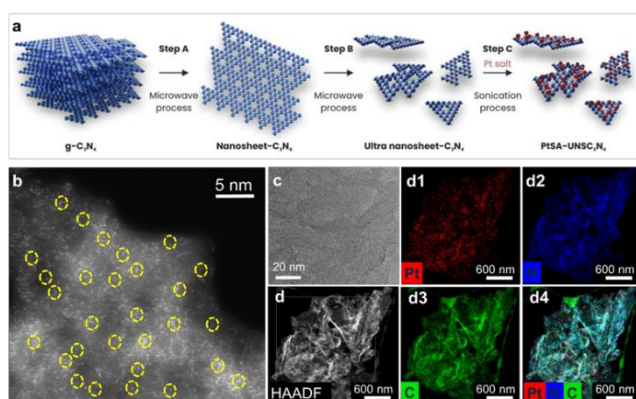
Projekt badawczy „Polonez Bis” NCN nr 2022/47/P/ST4/03412 [2024-2026]

(kierownik projektu: dr Priti Sharma, opiekun: dr hab. Dorota Rutkowaska-Żbik, prof. IKiFP PAN)

1. Zgłoszenie manuskryptu pt. „*Gram Scale Microwave-Assisted Synthesis of High-Density Fe Single Atomic Sites implanted N-Graphene for Enhanced Oxygen Reduction Reactio*” zostało przyjęte przez czasopismo *Small* (nr manuskryptu: smll.202501182).

W ramach naszych aktualnych badań opracowaliśmy katalizatory z pojedynczymi atomami żelaza osadzonymi na grafenie domieszkowanym azotem (FeSA-NG), wykorzystując metodę in-situ wspomaganą promieniowaniem mikrofalowym. Precyzyjne kontrolowanie parametrów syntezy, umożliwione przez mikrofałe, doprowadziło do jednorodnego rozproszenia atomów Fe w matrycy N-domieszkowanego grafenu, osiągając wysokie stężenie centrów aktywnych typu FeSA (14,05% wag., oznaczone metodą AAS). Testy elektrochemiczne wykazały, że katalizatory FeSA-NG cechują się znakomitą aktywnością w reakcji redukcji tlenu (ORR), osiągając wyższy potencjał początkowy (~0,98 V) oraz półfalowy (~0,89 V) w porównaniu do komercyjnych katalizatorów platynowych. Pogłębiona charakterystyka fizykochemiczna układów FeSA-NG, obejmująca badania operando oraz mechanistyczne, takie jak HAADF-STEM, XAS (tym FT-EXAFS, XANES oraz analiza falkowa (WT-EXAFS)), potwierdza skuteczne i jednorodne osadzenie atomów Fe skoordynowanych w sieci grafenu domieszkowanego azotem. Nasze wyniki podkreślają potencjał syntezy wspomaganą mikrofalami jako skalowalnej i efektywnej metody wytwarzania wysoko wydajnych katalizatorów z pojedynczymi atomami, lokując katalizatory FeSA-NG jako obiecującą alternatywę dla platyny w zastosowaniach energetyki zrównoważonej.

2. Dr Priti Sharma przekazała do publikacji manuskrypt pt. „*Sterowo trudne reakcje regioselektywnej diboracji i hydroboracji z zastosowaniem katalizatora platynowego z pojedynczym atomem*”<sup>4</sup>. Priti Sharma communicating the MS entitled 'Sterically Challenging Regioselective Diboration and Hydroboration Reactions with Single-Atom Platinum Catalyst.'



(a) Schematyczna ilustracja protokołu syntezy Pt-UNSC<sub>3</sub>N<sub>4</sub>. (b) Obraz STEM (skala 5 nm) ukazujący pojedyncze atomy Pt rozproszone na warstwie C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> (zaznaczone żółtymi okręgami). (c) Obraz TEM (skala 20 nm) niewykazujący obecności nanocząstek lub agregatów Pt. (d) Obraz HAADF-TEM wraz z mapowaniem pierwiastków HAADF-STEM ilustrujący rozkład Pt (d1), N (d2), C (d3) pojedynczo oraz łącznie (d4).

W niniejszym badaniu zaprezentowano skalowalną syntezę heterogenicznych katalizatorów platynowych z pojedynczymi atomami (Pt-SACs), osadzonych na ultracienkich warstwach grafitowego azotku węgla (g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>), z wykorzystaniem szybkiej techniki wspomaganą mikrofalami. Uzyskane katalizatory wykazują znakomitą regioselektywność, chemoselektywność oraz wyjątkową aktywność w selektywnej diboracji alkenów, umożliwiając precyzyjną diborację 1,2 w wyjątkowo łagodnych warunkach – nawet w temperaturze pokojowej.



## **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)

Projekt dotyczył opracowania innowacyjnej formy nanoemulsji zawierającej chemoterapeutyk SN-38. Celem projektu było zwiększenie skuteczności terapii przeciwnowotworowych poprzez zastosowanie nanoemulsji, która umożliwia precyzyjne dostarczanie leku do komórek nowotworowych, minimalizując wpływ na zdrowe tkanki i redukując skutki uboczne terapii.

W trakcie realizacji projektu uzyskano stabilną nanoemulsję, zachowującą właściwości przez co najmniej pięć miesięcy w warunkach chłodniczych (6–8°C). Badania *in vitro* wykazały zwiększoną skuteczność terapeutyczną SN-38 w połączeniu z nanoemulsją w porównaniu do samego leku. Wyniki *in vivo* na modelach heteroprzeszczepów raka jelita grubego HCT116 potwierdziły synergistyczne działanie formułacji, pozwalając na uzyskanie porównywalnego efektu terapeutycznego przy niższych dawkach SN-38. Dodatek emulsji umożliwił pięciokrotne zwiększenie inhibicji wzrostu guza w porównaniu z samym SN-38 w niskim stężeniu.

Rezultaty projektu otwierają nowe możliwości w personalizowanej medycynie onkologicznej, umożliwiając opracowanie skuteczniejszych i bezpieczniejszych terapii przeciwnowotworowych.

Osiągnięcia projektu zostały zwieńczone zgłoszeniem patentowym „Kompozycja w postaci nanoemulsji i jej zastosowanie w leczeniu nowotworów, zwłaszcza raka jelita grubego” (nr P.447923), które złożono do Urzędu Patentowego RP dnia 4 marca 2024 roku. To zgłoszenie podkreśla innowacyjność i potencjał wdrożeniowy opracowanej technologii, zwiększając jej wartość rynkową oraz perspektywy komercjalizacji.



## **Projekty Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej**



## **1. PROM Międzynarodowa wymiana stypendialna doktorantów i kadry akademickiej**



Projekt NAWA BPI/PRO/2024/1/00025/U/00001 PROM [2024-2025]

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

W listopadzie 2024 r. przygotowano regulaminy konkursów, a w grudniu 2024 r. ogłoszono dwa konkursy o stypendia na sfinansowanie kosztów krótkoterminowych form kształcenia za granicą dla doktorantów i kadry IKiFP PAN, oraz dla doktorantów z zagranicy na staże w IKiFP PAN.

## 2. Nanonośniki do dostarczania leków z fotosurfaktantami i polielektrolitami



Projekt badawczy NAWA BPN/BDE/2024/1/00031 [2024-2026]

(kierownik projektu: dr hab. Marcel Krzan)

Celem projektu jest opracowanie podstaw technologii wytwarzania interaktywnych nanonośników leków na bazie emulsji, opartej o mieszaniny fotosurfaktantów z polielektrolitami. Nano- i mikromateriały reagujące na światło znalazły ogromne zastosowanie w różnych obszarach, takich jak magazynowanie energii, elektronika molekularna, biomimetyka i dostarczanie leków. Włączenie surfaktantów o zmiennej aktywności powierzchniowej sterowanej światłem UV jako podstawy układu zdyspergowanego reagującego na bodźce jest kluczem do wywołania przestrzennie precyzyjnej interakcji w praktycznych zastosowaniach. Na przykład proste fotosurfaktanty na bazie azobenzenu zostały wykorzystane do tworzenia złożonych koacerwatów do wychwytywania i uwalniania biomolekuł. Obecnie kładzie się ogromne wysiłki w projektowanie nanonośników do dostarczania leków indukowanych bodźcami zewnętrznymi, takimi jak światło czy pole magnetyczne, ze względu na podawanie specyficzne dla miejsca, możliwość dostosowania dawkowania, minimalną ingerencję w zdrowe tkanki i ścisłą kontrolę czasoprzestrzenną. W rzeczywistości fotoizomeryzacja jest jednym z najprostszych mechanizmów uwalniania leku przy użyciu fotoreaktywnych nośników, obejmującym kapsułkowanie pożądanego leku przy użyciu izomeru E fotosurfaktanta i późniejsze uwalnianie po fotoizomeryzacji do izomeru Z. Uwalnianie poprzez fotoizomeryzację E/Z odbywa się za pośrednictwem zmiany polarności i hydrofilowości izomeru. Jednakże izomer Z większości amfifilów azobenzenu ma niską stabilność termiczną. Dlatego też, aby otrzymać efekt uwalniania leku, konieczne jest długotrwałe lub okresowe napromieniowanie UV o dużej intensywności. Aby uzyskać lepszą kontrolę nad kinetyką uwalniania leku indukowanego promieniowaniem UV, konieczne są fotoreaktywne nanonośniki, które mogą zapewniać przedłużone uwalnianie kapsułkowanego leku przy niskich intensywnościach i krótkich czasach ekspozycji na światło UV. Proponujemy zastosowanie arylazopirazoli (AAP), które są fotosurfaktantami o dłuższych okresach półtrwania izomeru Z wynoszącymi kilka dni do tygodni, pod warunkiem, że pH roztworu jest wystarczająco wysokie. W tych warunkach możliwe jest niemal całkowite fotoprzełączenie E/Z przy stanach fotostacjonarnych  $> 90\%$  i duże zmiany momentu dipolowego po fotoizomeryzacji. Dzięki zwiększonej stabilności izomeru Z, AAP jako rusztowanie fotoreaktywne mogą pozwolić na wytworzenie odpowiednich nośników leków, w których indukcja uwalniania leku zajdzie przy krótszej ekspozycji i mniejszym natężeniu promieniowania UV. Wprowadzenie do układu fotoprzełączalnych środków powierzchniowo czynnych, szczególnie tych na bazie arylazopirazolu AAP może znacząco przyspieszyć rozwój systemów dostarczania leków. Podobne środki powierzchniowo czynne oferują unikalne właściwości, które pozwalają na kontrolowane uwalnianie leków, zapewniając innowacyjne podejście do dostarczania leków. Projekt koncentruje się na zastosowaniu fotoprzełączalnych środków powierzchniowo czynnych AAP i ich mieszanin z polielektrolitami. Mieszaniny te oprócz znacznego potencjału do kontrolowanego dostarczania leków mogą być równocześnie stosowane jako emulgatory.

## **Programy HORYZONT**



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

Projekt badawczy nr 871034 [2020-2024]

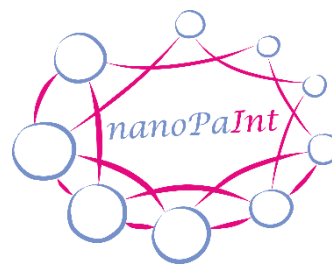
*(kierownik projektu: prof. dr hab. Łukasz Bratasz)*

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 ujednoliconego 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 2024 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. Pracę będą kontynuowane w ramach uzgodnionego projektu z Fundacją Gettiego.

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

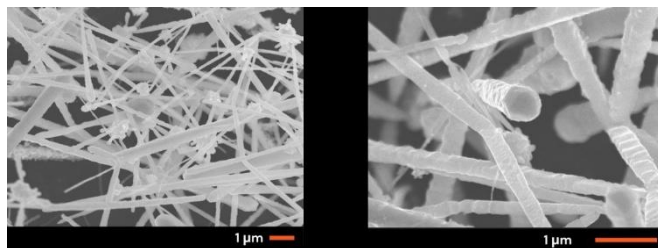
Projekt badawczy H2020-MSCA-ITN-2020 nr 955612 [2021-2024]  
(kierownik projektu: prof. dr. hab. Piotr Warszyński)



Nanotechnologia jest siłą napędową rozwoju nauki i technologii, umożliwiając tworzenie innowacyjnych rozwiązań w takich dziedzinach jak opieka zdrowotna, energetyka i elektronika. Tusze przewodzące są kluczowym elementem w produkcji drukowanych obwodów, elastycznych wyświetlaczy, czujników i urządzeń noszonych. Metaliczne nanocząstki są powszechnie stosowane, nanodruty oferują zalety: lepsze sieci perkolacyjne i mniejsze zużycie materiału. Te właściwości sprawiają, że nanodrutu są idealne do zastosowań wymagających elastyczności lub przezroczystości, a nasze badania koncentrują się na wykorzystaniu tych korzyści do opracowania wysokowydajnych tuszów przewodzących dla urządzeń nowej generacji.

W miedzianych nanodrutach (Cu NWs) zoptymalizowano parametry w celu uzyskania jednorodnej morfologii i stabilności. Do nanodrutów Cu@Ag (Cu@Ag NWs) dodanie nadmiaru amoniaku do  $\text{AgNO}_3$  tworząc kompleks  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ , stabilizowała jony miedzi i umożliwiała bardziej kontrolowaną reakcję galwanicznego osadzania srebra na nanodrutach. Ta modyfikacja skutkowała gładką i bardziej jednorodną powłoką srebrną (Rysunek 1b) w porównaniu z nieregularną powłoką bez dodatku amoniaku (Rysunek 1a), co poprawiło odporność na utlenianie i stabilność.

Tusze z nanodrutami zapewniają lepszą przewodność dzięki wysokiemu stosunkowi długości do średnicy oraz połączonym sieciom. Tusze przewodzące zostały sformułowane z użyciem glikolu dietylenowego (DEG) jako rozpuszczalnika ze względu na jego niską temperaturę wrzenia, co umożliwia skuteczne spiekanie w temperaturach do  $250^\circ\text{C}$ . Rysunek 2 przedstawia obraz optyczny tuszu na szklanym podłożu z jednorodnie rozproszonymi nanodrutami. Wstępne testy potwierdziły obiecującą przewodność, a przyszłe prace będą koncentrować się na optymalizacji formulacji tuszu pod kątem zastosowań w elektronice drukowanej, takich jak elastyczne wyświetlacze i czujniki.



Rys. 1: Obrazy SEM nanodrutów Cu@Ag. (a) Nadmiar  $\text{NH}_3$  do  $\text{AgNO}_3$  (b)  $\text{AgNO}_3$  bez dodatku  $\text{NH}_3$ .



Obraz mikroskopowy tuszu przewodzącego sformułowanego z nanodrutami Cu@Ag rozproszonymi w glikolu dietylenowym (DEG).

..

### 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)

Projekt NewCat jest realizowany przez konsorcjum czterech partnerów: Norwegian University of Life Science, Norwegia, koordynator, Politechnika Graz, Austria, IkiFP PAN, Polska i Politechnika Śląska, Polska. Projekty EIC Pathfinder opierają się na interdyscyplinarnej współpracy naukowej celem stworzenia nowych i przełomowych technologii. Zespół z IkiFP PAN wnosi do projektu swoją wiedzę i umiejętności z zakresu badań obliczeniowych nad metaloenzymami oraz z zakresu krystalografii białek.

Prace prowadzone w 2024 roku skupiały się na badaniach obliczeniowych, preparatyce białek oraz krystalizacji enzymów. W toku prac laboratoryjnych przeprowadzono hodowlę drożdży *Pichia pastoris* z nadprodukcją wytypowanych enzymów LPMO. Uzyskany materiał zagęszczono i oczyszczono na systemie FPLC. Pozyskany materiał enzymatyczny scharakteryzowano ilościowo i jakościowo, i wykorzystano do krystalizacji z dodatkiem/lub bez dodatku ligandów. Za cel krystalizacji zostały wybrane pięć homologów LPMOs (ang. lytic polysaccharide monooxygenases), z czego udało się uzyskać kryształy trzech, natomiast strukturę dwóch. Badania obliczeniowe obejmowały symulacje dynamiki molekularnej dla kompleksów enzym-substrat oraz racjonalne przeprojektowywanie enzymów z grupy LPMO.

#### **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)

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, rzeźb i obrazów sztalugowych.

Zespół badawczy kontynuował prace nad pękaniem szkła historycznego, wykorzystując technikę emisji akustycznej. Przetestowano dwa nowe rodzaje próbek szkła potasowego dostarczonych przez English Heritage. Próbkę poddano starzeniu w roztworze wodorowęglanu sodu, a następnie stopniowo zmniejszono wilgotność względną do 20%. W przeciwieństwie do poprzednich próbek, zarejestrowano słabsze sygnały AE. Dla wszystkich próbek zmierzono izotermy sorpcji przy użyciu mikrowagi próżniowej. Co ciekawe, dochodzenie do równowagi warstwy uwodnionej podczas desorpcji trwało co najmniej godzinę, a pękanie następowo w ciągu kilku minut po spadku RH.

W kilku lokalizacjach przeprowadzono kampanie monitorowania mikrouszkodzeń w oryginalnych obiektach eksponowanych w warunkach rzeczywistych w celu walidacji wyników modelowania. Między innymi uruchomiono monitoring AE w celu śledzenia rozwoju pęknięć wywołanych zmianami mikroklimatu w osiemnastowiecznej japońskiej lakierowanej komodzie autorstwa eksponowanej w Muzeum Wiktorii i Alberta w Londynie. Celem obecnego monitoringu było uzyskanie informacji o obecnym tempie rozwoju uszkodzeń i eksperymentalna weryfikacja koncepcji aklimatyzacji obiektów do określonego środowiska.

Ponadto, interferometria DSPI została użyta do mapowania odspojenia warstw dekoracyjnych tej samej komody i sekretarzyka z XVIII wieku, poddanej gruntownej konserwacji w 2013 r. przy użyciu różnych środków konsolidujących. Podobnie jak w przypadku pomiarów AE, obecne badania były kontynuacją pomiarów przeprowadzonych w 2013 i 2014 r., aby ustalić rozwój uszkodzeń w latach 2014–2024. Zgodnie z przyjętą hipotezą, zarejestrowany postęp rozwarstwienia warstw dekoracyjnych na czterech szufladach szafki był znacznie wolniejszy w latach 2014–2024 w porównaniu z postępem zmierzonym w 2014, rok po konserwacji. Obserwacja potwierdza założenie, że ryzyko uszkodzeń fizycznych wykraczających poza te, które już nagromadziły się w przeszłości, jest niskie w przypadku obiektu zaaklimatyzowanego do środowiska, w którym był przechowywany przez długi czas. Przeprowadzona konserwacja sprawiła, że ustabilizowane warstwy dekoracyjne stały się bardziej podatne na wahania klimatyczne, i nowe uszkodzenia narastały szybko, ale obiekt osiągnął nowy stan aklimatyzacji do warunków ekspozycji. Drugą obserwacją jest to, że w około czterech z 50 rozwarstwień zaobserwowano rozwój pęknięcia.

## **Inne międzynarodowe projekty badawcze**



## 1. Bioplastics upcycling loop (BioPolyCycle)

Projekt ANSO-CR-PP-2022-01

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

Najnowsze badania rozwinęły chemobiotechnologiczną metodę upcyklingu biodegradowalnych plastików, koncentrując się na efektywnej depolimeryzacji poliestarów, takich jak polikaprolakton (PCL), polilaktyd (PLA) i polihydroksymaślan (PHB), w wysokowartościowe produkty pośrednie. Produkty te zostały następnie wykorzystane jako substraty do fermentacji mikrobiologicznej w celu produkcji biopolimerów, w szczególności PHB. To innowacyjne podejście wpisuje się w ramy gospodarki obiegu zamkniętego, promując zrównoważone praktyki w zarządzaniu odpadami z tworzyw sztucznych, jednocześnie rozwiązując kluczowe wyzwania środowiskowe.

W badaniu zastosowano hydrolizę alkaliczną z użyciem wodorotlenku potasu (KOH) w metanolu, osiągając wysoką wydajność depolimeryzacji w zoptymalizowanych warunkach. Wydajność konwersji wynosiła 88–100% dla PHB, PCL i PLA przy zastosowaniu stechiometrycznych ilości KOH. Produkty degradacji zostały scharakteryzowane za pomocą spektroskopii FT-IR i bez dodatkowego oczyszczania wykorzystane jako substraty w kulturach bakteryjnych.

Eksperymenty przesiewowe z udziałem sześciu szczepów bakterii zidentyfikowały *Cupriavidus necator* B4383 jako najbardziej efektywnego kandydata do upcyklingu produktów degradacji w PHB. Szczep ten osiągnął zawartość PHB do 58% suchej masy komórkowej przy wykorzystaniu 3-hydroksymaślanu jako substratu. Inne substraty, takie jak kwas krotonowy i 6-hydroksykaprylan, również wspierały znaczną produkcję biopolimerów, choć z nieco mniejszą wydajnością. Z kolei kwas mlekowy wykazał ograniczony potencjał do syntezy PHB.

Wyniki te podkreślają wykonalność i skalowalność integracji degradacji abiotycznej i fermentacji mikrobiologicznej w jednym procesie, pokazując potencjał przekształcania odpadów bioplastikowych w wysokowartościowe biopolimery. To podejście dwutorowe nie tylko zmniejsza wpływ odpadów tworzyw sztucznych na środowisko, ale także wspiera przejście w kierunku zrównoważonej innowacji materiałowej.

## **2. Organosmektyty dotowane kationami nieorganicznymi jako adsorbenty o kontrolowanej hydrofilowości/hydrofobowości**

Polsko-czeski wspólny projekt na lata: 2024–2026 w ramach porozumienia o współpracy naukowej między Polską Akademią Nauk i Czeską Akademią Nauk (PAN-24-22)  
(kierownik projektu: *dr Dorota Duraczyńska*)

W ramach wspólnie realizowanego projektu w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk (IKiFP PAN) gościli następujący pracownicy z Instytutu Geoniki Czeskiej Akademii Nauk (UGN): dr Lenka Vaculíková i dr Eva Plevová (5–6 czerwca 2024 r. oraz 9–12 października 2024 r.) oraz dr Mahdi Niktabar (9–12 października 2024 r.). Natomiast dr Dorota Duraczyńska i dr Robert Kosydar, pracownicy IKiFP PAN, przebywali w UGN w dniach 5–12 grudnia 2024 r., a dr hab. Magdalena Oćwieja, prof. IKiFP PAN, odbyła wizytę w dniach 5–7 grudnia 2024 r.

Podczas pierwszej wizyty w IKiFP PAN przeprowadzono badania wstępnych preparatów, analizując ich morfologię oraz skład chemiczny za pomocą skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM). Technika ta umożliwiła uzyskanie szczegółowych obrazów powierzchni próbek oraz identyfikację ich składu elementarnego, co jest kluczowe dla zrozumienia ich właściwości adsorpcyjnych i strukturalnych. W trakcie spotkania opracowano szczegółowy plan badań, który obejmował procesy syntezy, charakterystyki oraz potencjalne zastosowania badanych próbek. Szczególną uwagę poświęcono metodom syntezy organosmektytów oraz technikom ich modyfikacji za pomocą kationów nieorganicznych. Skupiono się również na wszechstronnej charakterystyce fizykochemicznej próbek, aby dokładnie określić ich właściwości hydrofilowe i hydrofobowe. Dodatkowo omówiono potencjalne zastosowania opracowywanych materiałów jako adsorbentów w różnorodnych procesach technologicznych, co otwiera możliwości ich praktycznego wykorzystania w przemyśle.

W trakcie drugiej wizyty w IKiFP PAN przeprowadzono badania pięciu nowo zsyntetyzowanych próbek, koncentrując się na ich właściwościach hydrofobowych i hydrofilowych za pomocą analizy kąta zwilżania. Kąt zwilżania, będący miarą przylegania cieczy do powierzchni próbki, pozwala jednoznacznie określić, czy dany materiał charakteryzuje się hydrofobowością (wyższy kąt zwilżania) czy hydrofilowością (niższy kąt zwilżania). Dodatkowo wykorzystano technikę dyfrakcji rentgenowskiej (XRD) do analizy struktury krystalicznej próbek. Metoda ta umożliwiła identyfikację faz mineralnych oraz ocenę wielkości ziaren i stopnia krystaliczności, co jest kluczowe dla zrozumienia wpływu struktury wewnętrznej na właściwości hydrofobowe i hydrofilowe materiałów. Połączenie wyników uzyskanych z analizy kąta zwilżania i XRD dostarczyło kompleksowego wglądu w fizykochemiczne właściwości badanych materiałów. Takie dane są niezbędne dla ich dalszego rozwoju oraz potencjalnych zastosowań w dziedzinach takich jak inżynieria materiałowa, nanotechnologia czy przemysł chemiczny.

Podczas wizyty w UGN omówiono wyniki uzyskane w IKiFP PAN dla pięciu nowo zsyntetyzowanych próbek, obejmujące analizę za pomocą mikroskopii elektronowej i spektroskopii dyspersji energii (SEM/EDS), pomiary kąta zwilżania oraz potencjału zeta. Dodatkowo, przeprowadzono na miejscu badania z wykorzystaniem spektroskopii ramanowskiej. Przygotowano również cztery nowe próbki, które zostały przekazane do dalszej analizy w Instytucie Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN.

## **Projekty programu Erasmus+**



## **1. Projekt „Mobilność edukacyjna” dla studentów i pracowników**



Program EU Erasmus+ [2014-2027]

(koordynator programu: dr Agata Pomorska Gawel)

W 2024 roku zrealizowano następujące edukacyjne wyjazdy:

a) doktorantów na praktykę:

- Joanna Szechyńska University of Ostrava (Czechy)

b) pracowników na szkolenia:

- Andrzej Baliś– Laboratoire Charles Coulomb (Francja)
- Dzmitry Kharytonau– Lulea University of Technology (Szwecja)
- Konrad Skowron- Lulea- University of Technology (Szwecja)
- Małgorzata Ruggiero – University Erlangen (Niemcy)
- Anna Faruga- University of Belgrade (Serbia)
- Justyna Prajsnar- University of Belgrade (Serbia)
- Agata Wiertel- Pochopień- Czech Academy of Sciences (Czechy)
- Jan Zawała- Czech Academy of Sciences (Czechy)
- Maciej Szaleniec- University of Amsterdam (Holandia)

Efektem mobilności edukacyjnej było m.in. zebranie materiału badawczego do pracy doktorskiej, artykułów w czasopismach naukowych o międzynarodowym zasięgu i prezentacji konferencyjnych.

Projekt będzie kontynuowany w 2025 r.



**Finansowane przez  
Unię Europejską**



## **Dorobek publikacyjny instytutu za rok 2024**



## PRACE NAUKOWE OGŁOSZONE DRUKIEM

### PUBLIKACJE W CZASOPISMACH RECENZOWANYCH Z LISTY JOURNAL CITATION REPORTS

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. S.N. Anderson, C.T. Dederich, T. Borowski, L.M. Berreau "Thermal CO Release Reactivity of a  $\pi$ -Extended Flavonol Anion", *Organic Letters*, 26(48) (2025) 10253-10258, DOI: 10.1021/acs.orglett.4c03651
3. J. Andrys-Olek, A. Kluza, M. Tataruch, J. Heider, J. Korecki, T. Borowski "Bacteria at Work – Experimental and Theoretical Studies Reveal the Catalytic Mechanism of Ectoine Synthase", *Chemistry - A European Journal*, 30(23) (2024) e202304163, DOI: 10.1002/chem.202304163
4. G. Antczak, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, B. Gołyszny, N. Spiridis "Identification of CoPc + F16CuPc Chiral Domains by LEEM with the Molecular Structure Factor", *Journal of Physical Chemistry C*, 128(12) (2024) 5338-5344, DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c00386
5. S. Antropov, Ł. Bratasz "Development of craquelure patterns in paintings on panels", *Heritage Science*, 12(1) (2024) 89, DOI: 10.1186/s40494-024-01189-2
6. Z.U.D. Babar, M.B. Hanif, X.L. Lin, J. Gao, M. Mosiałek, C.-X. Li "Design of a highly stable and conductive electrolyte by suppressing barium copper oxide formation at the grain interfaces in Cux-doped BaCe0.7Zr0.1Dy0.2-xO3- $\delta$  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
7. A. Baliś, D. Lorens, A. Gut, S. Zapotoczny "Water-dispersable photoreactors based on core-shell mesoporous silica particles", *Scientific Reports*, 14 (2024) 11257, DOI: 10.1038/s41598-024-61750-8
8. A. Biessikirski, S. Gotovac Atlagić, M. Pytlik, Ł. Kuterasiński, M. Dworzak, M. Twardosz, M. Cała, J. Jakóbczyk, S. Sukur, A. Stopkowicz, A. Baziak, B.D. Napruszewska "Influence of the Nano-Iron Oxide Adsorption-Enhanced Microstructured Charcoal Additives on the ANFO's Properties", *Energies*, 17(2) (2024) 461, DOI: 10.3390/en17020461
9. A. Biessikirski, G. P. Kaczmarczyk, Ł. Kuterasiński, M. Kolano, M. Pytlik „Evaluation of Ammonium Nitrate(V) Morphology and Porosity Obtained by SEM and Tomography Imaging”, *Materials*, 17(13) (2024) 3156, DOI: 10.3390/ma17133156
10. A. Biessikirski, G.P. Kaczmarczyk, Ł. Kuterasiński, G. Machowski, A. Stopkowicz, M. Ruggiero-Mikołajczyk "Analysis of Wall Thickness and Absorption Characteristics of Ammonium Nitrate(V) from Various Sources", *Materials*, 17(18) (2024) 4618, DOI: 10.3390/ma17184618
11. A. Biessikirski, Ł. Kuterasiński, M. Dworzak, M. Kolano, M. Ruggiero-Mikołajczyk "Wykorzystanie tomografii komputerowej oraz SEM w ocenie morfologii przekrojów próbek azotanu(V) amonu", *Przemysł Chemiczny*, 1(7) (2024) 83-88, DOI: 10.15199/62.2024.7.8
12. Ł. Bratasz, Ł. Berger "Fire Risk Assessment in Museums on the HERIE Web-based Decision-supporting Platform: Evaluación del Riesgo de Incendio en Museos en la Plataforma Web de Apoyo a la Toma de Decisiones HERIE", *Studies in Conservation*, 69 (2024) 12-17, DOI: 10.1080/00393630.2024.2369830

13. S. Brizzi, B. Łydzba-Kopczyńska, C. Riminesi, B. Salvadori, T. Sawoszczuk, M. Strojceki, O. Syta, D. Thickett, J. Torres-Elguera, A. Towarek, M. Sawicki, B. Wagner "Surveying analytical techniques for a comprehensive analysis of airborne particulate samples in museum environments", *TrAC - Trends in Analytical Chemistry*, 176 (2024) 117766, DOI: 10.1016/j.trac.2024.117766
14. A. Brzyska, W. Płaziński "Modeling conformational changes in alginic acid oligomers induced by external forces", *Carbohydrate Research*, 545 (2024) 109294, DOI: 10.1016/j.carres.2024.109294
15. S. Bujok, A. Bridarolli, M. Lukomski, L. Bratasz "Reconsidering Museums' Climate and Seasonal Adjustment for Vulnerable Artifacts", *Studies in Conservation*, 69 (2024) 18-24, DOI: 10.1080/00393630.2024.2375162
16. M. Bury, Ł. Bratasz "Development of craquelure patterns in paintings on canvas", *Heritage Science*, 12 (2024) 375, DOI: 10.1186/s40494-024-01493-x
17. E. Cichoń, K. Kosowska, P. Pańtak, J.P. Czechowska, A. Zima, A. Ślósarczyk, "Physicochemical Properties of Inorganic and Hybrid Hydroxyapatite-Based Granules Modified with Citric Acid or Polyethylene Glycol", *Molecules*, 29 (2024) 2018, DOI: 10.3390/molecules29092018
18. S. Cudziło, B. Szermer-Olearnik, S. Dyjak, M. Gratzke, K. Sobczak, A. Wróblewska, A. Szczygieł, J. Mierzejewska, K. Węgierek-Ciura, A. Rapak, P. Żeliszewska, D. Kozień, Z. Pędzich, E. Pajtasz-Piasecka "Combustion Synthesis of Functionalized Carbonated Boron Nitride Nanoparticles and Their Potential Application in Boron Neutron Capture Therapy", *Materials*, 17(10) (2024) 2438, DOI: 10.3390/ma17102438
19. B. Donarska, J. Cytarska, D. Kołodziej-Sobczak, R. Studzińska, D. Kupczyk, A. Baranowska-Łączkowska, K. Jaroch, P. Szeliska, B. Bojko, D. Różycka, A.B. Olejniczak, W. Płaziński, K.Z. Łączkowski "Synthesis of Carborane–Thiazole Conjugates as Tyrosinase and 11 $\beta$ -Hydroxysteroid Dehydrogenase Inhibitors: Antiproliferative Activity and Molecular Docking Studies", *Molecules*, 29 (2024) 4716, DOI: 10.3390/molecules29194716
20. A. Drabczyk, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Jamróży, M. Krzan "Biomaterials in Drug Delivery: Advancements in Cancer and Diverse Therapies—Review", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(6) (2024) 3126, DOI: 10.3390/ijms25063126
21. M. Drozdowska, E. Piasna-Słupecka, A. Such, K. Dziadek, P. Krzyściak, T. Kruk, D. Duraczyńska, M. Morawska-Tota, E. Jamróz "Design and In Vitro Activity of Furcellaran/Chitosan Multilayer Microcapsules for the Delivery of Glutathione and Empty Model Multilayer Microcapsules Based on Polysaccharides", *Materials*, 17(9) (2024) 2047, DOI: 10.3390/ma17092047
22. M. Duda, M. Oszejca, M. Grzesiak-Nowak, W. Łasocha "Odd-even trends in the series of new bis( $\alpha,\omega$ -alkanediamine)dibromocadmium(II) coordination polymers: Crystal structure and thermal decomposition", *Journal of Molecular Structure*, 1318 (2024) 139285, DOI: 10.1016/j.molstruc.2024.139285
23. K. Dymek, G. Kurowski, K. Hyjek, A. Boguszevska-Czubara, A. Biernasiuk, A. Pajdak, L. Kuterasiński, W. Piskorz, M. Gajewska, J. Bała, S. Zapotoczny, P.J. Jodłowski "Metal-organic frameworks@silks composites as efficient levofloxacin carriers against nosocomial infections and pathogens", *Applied Materials Today*, 36 (2024) 102044, DOI: 10.1016/j.apmt.2023.102044

24. A. Dziwoki, B. Blyzniuk, K. Freindl, E. Madej, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, N. Spiridis "The Use of External Fields (Magnetic, Electric, and Strain) in Molecular Beam Epitaxy—The Method and Application Examples", *Molecules*, 29(13) (2024) 3162, DOI: 10.3390/molecules29133162
25. J.G.D. Elsberg, T. Borowski, E.W. Reinheimer, L.M. Berreau "Anion- and water-facilitated oxidative carbon–carbon bond cleavage and diketonate carboxylation in Cu(II) chlorodiketonate complexes", *Inorganica Chimica Acta*, 571 (2024) 122203, DOI: 10.1016/j.ica.2024.122203
26. C.I. Eneh, K. Nixon, S.M. Lalwani, M. Sammalkorpi, P. Batys, J.L. Lutkenhaus "Solid-Liquid-Solution Phases in Poly(diallyldimethylammonium)/Poly(acrylic acid) Polyelectrolyte Complexes at Varying Temperatures", *Macromolecules*, 57(5) (2024) 2363-2375, DOI: 10.1021/acs.macromol.4c00258
27. J. Flieger, N. Żuk, S. Pasieczna-Patkowska, M. Kuśmierz, R. Panek, W. Franus, J. Baj, G. Buszewicz, G. Teresiński, W. Płaziński "Selective Removal of Chlorophyll and Isolation of Lutein from Plant Extracts Using Magnetic Solid Phase Extraction with Iron Oxide Nanoparticles", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(6) (2024) 3152, DOI: 10.3390/ijms25063152
28. K. Gawlińska-Nęcek, R.P. Socha, Z. Starowicz, Ł. Major, P. Panek "Ambient Stability of Sodium-Doped Copper Oxide Obtained through Thermal Oxidation", *Materials*, 17(19) (2024) 4823, DOI: 10.3390/ma17194823
29. Y. Gemmecker, A. Winiarska, D. Hege, J. Kahnt, A. Seubert, M. Szaleniec, J. Heider "A pH-dependent shift of redox cofactor specificity in a benzyl alcohol dehydrogenase of *aromatoleum aromaticum* EbN1", *Applied Microbiology and Biotechnology*, 108(1) (2024) 410, DOI: 10.1007/s00253-024-13225-z
30. F. Gerony, K. Poznanska, Sonia Bujok, L. de Viguerie, L. Michot, B. Lanson, S. Casale, F. Gaslain, J. Korecki, K. Freindl, N. Spiridis, C. Thillaye du Boullay, A.-L. Rollet, G. Meriguet, M. Jaber "Multiscale characterization of liquid and dry egg tempera paints based on ochre pigments", *Progress in Organic Coatings*, 197 (2024) 18820, DOI: 10.1016/j.porgcoat.2024.108820
31. P. Gnacek, N. Piergies, P. Niemiec, O. Kowalska, M. Oćwieja "Spectroscopic studies under properties of chlorpromazine conjugated to gold nanoparticles", *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 320 (2024) 124588, DOI: 10.1016/j.saa.2024.124588
32. G.G. Gochev, R.A. Campbell, E. Schneck, J. Zawała, P. Warszyński "Exploring proteins at soft interfaces and in thin liquid films – From classical methods to advanced applications of reflectometry", *Advances in Colloid and Interface Science*, 329 (2024) 103187, DOI: 10.1016/j.cis.2024.103187
33. G.G. Gochev, E. Schneck, R. Miller "Effects of Aqueous Isotopic Substitution on the Adsorption Dynamics and Dilational Rheology of  $\beta$ -Lactoglobulin Layers at the Water/Air Interface", *Journal of Physical Chemistry B*, 128(11) (2024) 2821-2830, DOI: 10.1021/acs.jpcb.3c08417
34. A. Gorczyca, S.W. Przemieniecki, M. Oćwieja "Comparative effect of silver nanoparticles on maize rhizoplane microbiome in initial phase of plants growth", *International Agrophysics*, 38(2) (2024) 155-164, DOI: 10.31545/intagr/184863

35. W. Grzebieniarz, 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
36. 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<sub>0.9-x</sub>MoxY<sub>0.1</sub>O<sub>3-δ</sub> triple conducting composite for solid oxide fuel cells: Part II", *Energy*, 289 (2024) 129985, DOI: 10.1016/j.energy.2023.129985
37. K. Harażna, A.T. Fricker, R. Konefał, A. Medaj, M. Zimowska, B. Leszczyński, A. Wróbel, A.J. Bojarski, I. Roy, M. Guzik "Physicochemical, structural and biological characterisation of poly(3-hydroxyoctanoate) supplemented with diclofenac acid conjugates — Harnessing the potential in the construction of materials for skin regeneration processes", *International Journal of Biological Macromolecules*, 268 (2024) 131476, DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2024.131476
38. K. Harażna, K. Grzela, K. Stępień-Hońubczat, H. Beneš, J. Hodan, M. Nevoralová, G. Santos Medeiros, S. Bujok, M. Guzik "Novel, eco-friendly  $\alpha$ -tocopherol/layered double hydroxides/poly(3-hydroxyoctanoate)-based active packaging materials with enhanced antimicrobial, barrier and antioxidant activities", *Chemical Engineering Journal*, 500 (2024) 156959, DOI: 10.1016/j.cej.2024.156959
39. M. Irshad, A. Mukhtar, A. Nadeem Tabish, M.Bilal Hanif, M. Sheraz, V. Liapun, M. Zubair Khan, F. Batool, M. Imran, M. Rafique, J. Gurgul, T. Alshahrani, M. Mosiałek, J. Kim, R.T. Baker, M. Motola "Harnessing Bio-Based Chelating Agents for Sustainable Synthesis of AgNPs: Evaluating Their Inherent Attributes and Antimicrobial Potency in Conjunction with Honey", *Heliyon*, 10(10) (2024) e31424, DOI: 10.1016/j.heliyon.2024.e31424
40. B. Jachimska, M. Goncerz, P. Wolski, C. Meldrum, Ł. Lustyk, T. Pańczyk "Theoretical and Experimental Analyses of the Interfacial Mechanism of Dendrimer–Doxorubicin Complexes Formation", *Molecular Pharmaceutics*, 21 (2024) 5892-5904, DOI: 10.1021/acs.molpharmaceut.4c00941
41. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, M. Krzan "Advanced Drug Carriers: A Review of Selected Protein, Polysaccharide, and Lipid Drug Delivery Platforms", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(2) (2024) 786, DOI: 10.3390/ijms25020786
42. A. Janas, N. Avgerou, M.N. Charalambides, L. Fuster-López, Ł. Bratasz "Fracture toughness of aged oil paints", *Heritage Science*, 12(1) (2024) 103, DOI: 10.1186/s40494-024-01224-2
43. D. Jantas, M. Leśkiewicz, M. Regulska, M. Procter, P. Warszyński, W. Lasoń "Protective Effects of Cannabidiol (CBD) against Oxidative Stress, but Not Excitotoxic-Related Neuronal Cell Damage—An In Vitro Study", *Biomolecules*, 14 (2024) 564, DOI: 10.3390/biom14050564
44. D. Jantas, P. Warszyński, W. Lasoń "Carnosic Acid Shows Higher Neuroprotective Efficiency than Edaravone or Ebselen in In Vitro Models of Neuronal Cell Damage", *Molecules*, 29(1) (2024) 119, DOI: 10.3390/molecules29010119
45. A. Javadi, L. Liggieri, E.V. Aksenenko, G.G. Gochev, R. Miller "Advances in drop and bubble profile analysis tensiometry", *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 73 (2024) 101846, DOI: 10.1016/j.cocis.2024.101846

46. P. J. Jodłowski, K. Dymek, G. Kurowski, K. Hyjek, A. Boguszcwska-Czubara, B. Budzyńska, W. Mrozek, N. Skoczylas, Ł. Kuterasiński, W. Piskorz, M. Białoruski, R. J. Jędrzejczyk, P. Jeleń, M. Sitarz „Crystal Clear: Metal–Organic Frameworks Pioneering the Path to Future Drug Detox”, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 16(23) (2024) 29657-29671, DOI: 10.1021/acsami.4c02450
47. 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(2) (2024) e202314469, DOI: 10.1002/anie.202314469
48. J. Kaim, M. Śliwa, Ł. Kuterasiński, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska, G. Mordarski, R. Karcz, J. Podobiński, J. Datka, D. Rutkowska-Żbik "Gas-phase hydrogenation and decarbonylation of furfuryl aldehyde over catalysts containing Cu and Ni", *Catalysis Today*, 441 (2024) 114897, DOI: 10.1016/j.cattod.2024.114897
49. A.A. Kasach, A. Kasprzhitskii, D.S. Kharytonau, A.V. Pospelau, I.I. Kurilo, G. Lazorenko "Electrocrystallization of Cu, Sn, and Cu-Sn alloys from sulfate electrolytes in the presence of thiourea and N-octylpyridinium bromide: Experimental and computational studies", *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 685 (2024) 133321, DOI: 10.1016/j.colsurfa.2024.133321
50. T. Kastinen, P. Batys, D. Tolmachev, K. Laasonen, M. Sammalkorpi "Ion-Specific Effects on Ion and Polyelectrolyte Solvation", *ChemPhysChem*, 25(15) (2024) e202400244, DOI: 10.1002/cphc.202400244
51. 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
52. G. Khachatryan, J. Pląder, K. Piechowicz, T. Witczak, M. Liszka-Skoczylas, M. Witczak, D. Galkowska, D. Duraczynska, W. Hunter, A. Waradzyn, K. Khachatryan "Preparation and Study of the Physicochemical and Functional Properties of Nano/Micromicellar Structures Containing Chokeberry Fruit Pomace Extracts Using Egg White and Egg Yolk", *International Journal of Molecular Sciences*, 25 (2024) 8405, DOI: 10.3390/ijms25158405
53. K. Khivantsev, M.A. Derewinski, L. Kovarik, M. Bowden, X.S. Li, N.R. Jaegers, D. Boglajenko, X.I. Pereira-Hernandez, C. Pearce, Y. Wang, J. Szanyi "Increasing Al-Pair Abundance in SSZ-13 Zeolite via Zeolite Synthesis in the Presence of Alkaline Earth Metal Hydroxide Produces Hydrothermally Stable Co-, Cu- and Pd-SSZ-13 Materials", *Catalysts*, 14(1) (2024) 56, DOI: 10.3390/catal14010056
54. A. Klimek, A. Gaweł, K. Górniak, A. Tomczyk-Chmiel, E.M. Serwicka, K. Bahranowski "CO<sub>2</sub> Sorption on Ti-, Zr-, and [Ti,Zr]-Pillared Montmorillonites", *Materials*, 17(16) (2024) 4036, DOI: 10.3390/ma17164036
55. A.I. Klyndyuk, D.S. Kharytonau, I.V. Matsukevich, E.A. Chizhova, Z. Lenčėš, R.P. Socha, M. Zimowska, O. Hanzel, M. Janek "Effect of cationic nonstoichiometry on thermoelectric properties of layered calcium cobaltite obtained by field assisted sintering technology (FAST)", *Ceramics International*, 50(17) (2024) 30970-30979, DOI: 10.1016/j.ceramint.2024.05.402

56. M. Korčušková, J. Svatík, W. Tomal, A. Šikyňová, V. Vishakha, F. Petko, M. Galek, P. Stalmach J. Ortyl P. Lepcio "Anatase and rutile nanoparticles in photopolymer 3D-printed nanocomposites: Band gap-controlled electron interactions in free-radical and cationic photocuring", *Reactive and Functional Polymers*, 200 (2024) 105923, DOI: 10.1016/j.reactfunctpolym.2024.105923
57. D. Kosior, A. Wiertel-Pochopień, M. Morga, Ł. Witkowski, J. Zawała "Effect of Synthetic Polypeptide–Bio-Surfactant Composition on the Formation and Stability of Foams", *Minerals*, 14(11) (2024) 1110, DOI: 10.3390/min14111110
58. R. Kosydar, E. Lalik, J. Gurgul, T. Szumelda, A. Drelinkiewicz "The activity of PdIr/C bimetallic catalysts for the furfural conversion in alcohol solvent via competitive reactions of hydrogenation and acetalization", *International Journal of Hydrogen Energy*, 60 (2024) 293-307, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.02.155
59. O. Kowalska, N. Piergies, A. Barbasz, P. Niemiec, P. Gnacek, D. Duraczyńska, M. Oćwieja "Spectroscopic Properties and Biological Activity of Fluphenazine Conjugates with Gold Nanoparticles", *Molecules*, 29(24) (2024) 5948, DOI: 10.3390/molecules29245948
60. G. Kowalski, M. Witzak, Ł. Kuterasiński "Structure Effects on Swelling Properties of Hydrogels Based on Sodium Alginate and Acrylic Polymers", *Molecules*, 29(9) (2024) 1937, DOI: 10.3390/molecules29091937
61. M. Krzan, A. Drabczyk, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Jamroży "Foams based on biosurfactants solutions. Part I. Influence of biosurfactant origin on foaming properties", *Current Opinion in Colloid and Interface Science*, 72 (2024) 101821, DOI: 10.1016/j.cocis.2024.101821
62. M. Krzan, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, W. Kieres "Foams based on biosurfactants mixtures. Part II. Influence of mixtures composition on foam formation and stability", *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, 73 (2024) 101825, DOI: 10.1016/j.cocis.2024.101825
63. S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, A. Przybyłowicz, W. Kieres, M. Krzan "Development and Analysis of Bilayer Foamed Oleogels Stabilized with Ecogel™: Exploring the Role of Tween 80 in Modifying Physicochemical Properties", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(23) (2024) 12632, DOI: 10.3390/ijms252312632
64. S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, A. Przybyłowicz, M. Krzan "Linseed Oil-Based Oleogel Vehicles for Hydrophobic Drug delivery – Physicochemical and Applicative Properties", *Pharmaceutics*, 16(5) (2024) 600, DOI: 10.3390/pharmaceutics16050600
65. S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Przybyłowicz, A. Drabczyk, W. Kieres, R. Socha, M. Krzan "Study on the Effect of Emulsifiers on the Properties of Oleogels Based on Olive Oil Containing Lidocaine", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(20) (2024) 11067, DOI: 10.3390/ijms252011067
66. P. Kumar, M. Eriksson, D.S. Kharytonau, S. You, M.M. Natile, A. Vomiero "All-Inorganic Hydrothermally Processed Semitransparent Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> Solar Cells with CuSCN as the Hole Transport Layer", *ACS Applied Energy Materials*, 7(4) (2024) 1421-1432, DOI: 10.1021/acsaem.3c02492
67. A. Kusior, K. Michalec, A. Micek-Ilnicka, M. Radecka "Unraveling the Impact of Adsorbed Molecules on Photocatalytic Processes: Advancements in Understanding Facet-Controlled Semiconductor Photocatalysts", *Molecules*, 29(10) (2024) 2290-2308, DOI: 10.3390/molecules29102290

68. Ł. Kuterasiński, M. Sadowska, P. Żeliszewska, B.D. Napruszewska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Pytlik, A. Biessikirski „Cu-Containing Faujasite-Type Zeolite as an Additive in Eco-Friendly Energetic Materials”, *Molecules*, 29(13) (2024) 3184, 10.3390/molecules29133184
69. T. Laakko, A. Korkealaakso, B.F. Yildirim, P. Batys, V. Liljeström, A. Hokkanen, Nonappa, M. Penttilä, A. Laukkanen, A. Miserez, C. Södergård, P. Mohammadi "Accelerated Engineering of ELP-Based Materials through Hybrid Biomimetic-De Novo Predictive Molecular Design", *Advanced Materials*, 36(28) (2024) 2312299, DOI: 10.1002/adma.202312299
70. S.M. Lalwani, K. Hellikson, P. Batys, J.L. Lutkenhaus "Counter Anion Type Influences the Glass Transition Temperature of Polyelectrolyte Complexes", *Macromolecules*, 57(10) (2024) 4695–4705, DOI: 10.1021/acs.macromol.3c02200
71. A.M. Leshansky, B.Y. Rubinstein, I. Fouxon, D. Johannsmann, M. Sadowska, Z. Adamczyk "Quartz Crystal Microbalance Frequency Response to Discrete Adsorbates in Liquids", *Analytical Chemistry*, 96 (2024) 10559-10568, DOI: 10.1021/acs.analchem.4c00968
72. K. Lis, J. Szechyńska, D. Träger, J. Sadlik, K. Niziołek, D. Słota, J. Jampilek, A. Sobczak-Kupiec "Hybrid Polymer–Inorganic Materials with Hyaluronic Acid as Controlled Antibiotic Release Systems", *Materials*, 17(1) (2024) 58, DOI: 10.3390/ma17010058
73. G. Loglio, A. Czakaj, E. Jarek, V.I. Kovalchuk, M. Krzan, L. Liggieri, R. Miller, P. Warszynski "An Adoption of the Fractional Maxwell Model for Characterizing the Interfacial Dilational Viscoelasticity of Complex Surfactant Systems", *Colloids and Interfaces*, 8(4) (2024) 44, DOI: 10.3390/colloids8040044
74. V. Lutsyk, W. Plazinski "Exploring Ring Conformation in Uronate Monosaccharides: Insights from Ab Initio Calculations and Classical Molecular Dynamics Simulations", *Journal of Physical Chemistry B*, 128(2) (2024) 472-491, DOI: 10.1021/acs.jpcb.3c06556
75. V. Lutsyk, P. Wolski, W. Plazinski "The Conformation of Glycosidic Linkages According to Various Force Fields: Monte Carlo Modeling of Polysaccharides Based on Extrapolation of Short-Chain Properties", *Journal of Chemical Theory and Computation*, 20 (2024) 6350-6368, DOI: 10.1021/acs.jctc.4c00543
76. T.M. Majka, K.N. Raftopoulos, E. Hebda, A. Szeligowski, O. Zastawny, M. Guzik, K. Pielichowski "PHB+aPHA Blends: From Polymer Bacterial Synthesis through Blend Preparation to Final Processing by Extrusion for Sustainable Materials Design", *Materials*, 17(13) (2024) 3105, DOI: 10.3390/ma17133105
77. I. Malagurski, J. Lazic, T. Ilic-Tomic, A. Salevic, M. Guzik, M. Krzan, J. Nikodinovic-Runic, M. Ponjavic "Double layer bacterial nanocellulose - poly(hydroxyoctanoate) film activated by prodigiosin as sustainable, transparent, UV-blocking material suitable for food packaging applications", *International Journal of Biological Macromolecules*, 279 (2024) 135087, DOI: 10.1016/j.ijbiomac.2024.135087
78. M. Mączka, M. Guzik, M. Mosiałek, M. Wojnarowska, P. Pasierb, T. Nitkiewicz "Life cycle assessment of experimental Al-ion batteries for energy storage applications", *Science of The Total Environment*, 912 (2024) 169258, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.169258
79. R. Meenambal, T. Kruk, K. Jakubowska, J. Gurgul, K. Szczepanowicz, M. Szczęch, L. Szyk-Warszyńska, P. Warszyński, D. Jantas "Influence of Eu<sup>3+</sup> doping on physiochemical properties and neuroprotective potential of polyacrylic acid functionalized cerium oxide nanoparticles", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(5) (2024) 2501, DOI: 10.3390/ijms25052501

80. A. Micek-Ilnicka, N. Ogrodowicz, E. Lalik, M. Zimowska "TiO<sub>2</sub> promoted alcohol dehydrations on the Wells-Dawson type heteropolyacids", *Applied Catalysis A: General*, 687 (2024) 119947-119960, DOI: 10.1016/j.apcata.2024.119947
81. 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
82. J. Mokrzycki, M. Fedyna, D. Duraczyńska, M. Marzec, R. Panek, W. Franus, T. Bajda, R. Karcz "Mesoporous Silica MCM-41 from Fly Ash as a Support of Bimetallic Cu/Mn Catalysts for Toluene Combustion", *Materials*, 17(3) (2024) 653, DOI: 10.3390/ma17030653
83. J. Mokrzycki, E. Wolak, A. Orzechowska-Zieba, Kun Zheng, D. Duraczynska, M. Marzec, M. Fedyna "The effect of copper(II) salt precursor on physicochemical properties of HKUST-1 MOFs and their application as adsorbents of Cr(III) ions from aqueous solutions", *Journal of Water Process Engineering*, 64 (2024) 105761, DOI: 10.1016/j.jwpe.2024.105761
84. J. Mrówka, R. Kosydar, K. Kornaus, J. Partyka, M. Hasik "Macroporous Poly(hydromethylsiloxane) Networks as Precursors to Hybrid Ceramics (Ceramers) for Deposition of Palladium Catalysts", *Molecules*, 29(16) (2024) 3808, DOI: 10.3390/molecules29163808
85. B.D. Napruszewska, D. Duraczyńska, J. Kryściak-Czerwienka, P. Nowak, E.M. Serwicka "Clay Minerals/TiO<sub>2</sub> Composites—Characterization and Application in Photocatalytic Degradation of Water Pollutants", *Molecules*, 29(20) (2024) 4852, DOI: 10.3390/molecules29204852
86. B.D. Napruszewska, A. Walczyk, D. Duraczynska, J. Kryściak-Czerwienka, R. Karcz, A. Gawel, P. Nowak, E.M. Serwicka "TiO<sub>2</sub> Nanoparticles with Adjustable Phase Composition Prepared by an Inverse Microemulsion Method: Physicochemical Characterization and Photocatalytic Properties", *Nanomaterials*, 14(13) (2024) 1130, DOI: 10.3390/nano14131130
87. M. Nattich-Rak, D. Kosior, M. Morga, Z. Adamczyk "Kinetics of Human Serum Albumin Adsorption on Macroion Functionalized Silica", *Biomolecules*, 14(5) (2024) 531, DOI: 10.3390/biom14050531
88. M. Nattich-Rak, M. Sadowska, Z. Adamczyk, T. Basinska, D. Mickiewicz, M. Gadzinowski "Deposition of Human-Serum-Albumin-Functionalized Spheroidal Particles on Abiotic Surfaces: Reference Kinetic Results for Bioparticles", *Molecules*, 29 (2024) 3405 (1-16), DOI: 10.3390/molecules29143405
89. P. Neves, G. Simões, B.D. Napruszewska, K. Pamin, P. Serda, W. Łasocha, A.A. Valente "Versatile Polyoxometalates of Different Structural Dimensionalities for Liquid Phase Catalytic Oxidation", *Catalysts*, 14(4) (2024) 251, DOI: 10.3390/catal14040251
90. J. Nieszporek, T. Pańczyk, K. Nieszporek "The Comparison of Catalytic Activity of Carbimazole and Methimazole on Electroreduction of Zinc (II) in Chlorates (VII): Experimental and Molecular Modelling Study", *Molecules*, 29(15) (2024) 3455, DOI: 10.3390/molecules29153455
91. P. Obara, P. Wolski, T. Pańczyk "Insights into the Molecular Structure, Stability, and Biological Significance of Non-Canonical DNA Forms, with a Focus on G-Quadruplexes and i-Motifs", *Molecules*, 29(19) (2024) 4683, DOI: 10.3390/molecules29194683
92. M. Oćwieja, A. Barbasz, O. Kowalska, J. Maciejewska-Prończuk, A. Lada "The Adsorption of Chlorpromazine on the Surface of Gold Nanoparticles and Its Effect on the Toxicity to Selected Mammalian Cells", *Materials*, 17(19) (2024) 4774, DOI: 10.3390/ma17194774

93. M. Oćwieja, A. Barbasz, M. Wasilewska, P. Smoleń, D. Duraczyńska, B.D. Napruszewska, M. Kozak, A. Węgrzynowicz "Surface Charge-Modulated Toxicity of Cysteine-Stabilized Silver Nanoparticles", *Molecules*, 29(15) (2024) 3629, DOI: 10.3390/molecules29153629
94. J. Odrobinska-Baliś, E. Gumieniczek-Chłopek, T. Uchacz, P. Banachowicz, A. Medaj, S. Zapotoczny "Spontaneous Fusion of Core-Shell Nanocapsules with Oil Cores and Oppositely Charged Polysaccharide Shells", *Small*, 20 (2024) 2311909, DOI: 10.1002/sml.202311909
95. J. Odrobińska-Baliś, M. Procter, K. Krużel, M. Regulska, M. Leśkiewicz, D. Duraczyńska, S. Zapotoczny, W. Lasoń, K. Szczepanowicz "Chitosan-Based Nanocapsules as a Delivery System of Hydrophobic Carnosic Acid, A Model Neuroprotective Drug", *Nanotechnology, Science and Applications*, 17 (2024) 259-271, DOI: 10.2147/NSA.S490372
96. D. Oniani, J. Hilsman, C. Zang, J. Wang, L. Cai, J. Zawala, Y. Wang "Emerging opportunities of using large language models for translation between drug molecules and indications", *Scientific Reports*, 14(1) (2024) 10738, DOI: 10.1038/s41598-024-61124-0
97. Ł. Orzeł, A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Zbik, A. Krasowska, L. Fiedor, R. van Eldik, G. Stochel "Copper(II)-Assisted Degradation of Pheophytin a by Reactive Oxygen Species", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(3) (2024) 1831, DOI: 10.3390/ijms25031831
98. M.A. Osipenko, J. Karczewski, M. Dominów, M. Prześniak-Welenc, J. Gurgul, I. I. Kurilo, J. Ryl, D.S. Kharytonau "Exploring mechanism of corrosion inhibition of WE43 and AZ31 alloys by aqueous molybdate in Hank's solution by multisine impedimetric monitoring", *Corrosion Science*, 231 (2024) 111979, DOI: 10.1016/j.corsci.2024.111979
99. M.A. Osipenko, A.V. Paspelau, A.A. Kasach, J. Ryl, K. Skowron, J. Adamiec, I.I. Kurilo, D.S. Kharytonau "Corrosion Inhibition of AZ31-xLi (x = 4, 8, 12) magnesium alloys in sodium chloride solutions by aqueous molybdate", *Corrosion Science*, 241 (2024) 112513, DOI: 10.1016/j.corsci.2024.112513
100. 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*, 59 (2024) 2788-2813, DOI: 10.1007/s10853-024-09361-6
101. T. Panczyk, K. Nieszporek, P. Wolski "Modeling the degradation of polypropylene and polystyrene under shock compression and mechanical cleaving using the ReaxFF force field", *Chemosphere*, 357 (2024) 142056, DOI: 10.1016/j.chemosphere.2024.142056
102. T. Panczyk, K. Nieszporek, P. Wolski "Surface chemistry of degraded polyethylene terephthalate (PET): Insights from reactive molecular dynamics study", *Applied Surface Science*, 654 (2024) 159493, DOI: 10.1016/j.apsusc.2024.159493
103. T. Panczyk, P. Wolski, K. Nieszporek, R. Pietrzak "Adsorption of Methylene Blue on Activated Carbon Surfaces Obtained by Shock Compression of Graphite Using Reactive Molecular Dynamics", *Molecules*, 29(24) (2024) 6030, DOI: 10.3390/molecules29246030
104. A. Panek, P. Wójcik, A. Świzdor, M. Szaleniec, T. Janeczko "Biotransformation of  $\Delta^1$ -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

105. A.V. Paspelau, A.A. Kasach, J. Gurgul, G. Mordarski, K. Skowron, I.I. Kurilo, D.S. Kharytonau "Deposition and corrosion performance of phosphate-poly(lactic acid) composite coatings on WE43 magnesium alloy", *Surface and Coatings Technology*, 478 (2024) 130419, DOI: 10.1016/j.surfcoat.2024.130419
106. W. Plazinski, V. Lutsyk, A. Plazinska "Exploring Free Energies of Specific Protein Conformations Using the Martini Force Field", *Journal of Chemical Theory and Computation*, 20(5) (2024) 2273-2283, DOI: 10.1021/acs.jctc.3c01155
107. J. Podobiński, J. Datka "Basic Properties of ZnO, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, and MgO—Quantitative IR Studies", *Catalysts*, 14(2) (2024) 106, DOI: 10.3390/catal14020106
108. J. Podobiński, J. Datka "Basic Sites on Alumina with Preadsorbed Ethanol and Ammonia—An IR Study", *Molecules*, 29(8) (2024) 1726, DOI: 10.3390/molecules29081726
109. J. Podobiński, J. Datka "Characterisation of Basic Sites on Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, and ZnO with Preadsorbed Ethanol and Ammonia—IR Study", *Molecules*, 29(13) (2024) 3070, DOI: 10.3390/molecules29133070
110. J. Podobiński, M. Śliwa, J. Datka "Determination of concentration of basic sites on oxides by IR spectroscopy", *Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 320 (2024) 124548, DOI: 10.1016/j.saa.2024.124548
111. A.V. Pospelov, A.A. Kasach, D.S. Kharitonov, A.R. Tsyganov, I.I. Kurilo "The Influence of Plasma Electrolytic Oxidation Parameters on the Composition, Structure, and Surface Properties of Rare-Earth WE43 Magnesium Alloy", *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*, 60(3) (2024) 449-462, DOI: 10.1134/s2070205124701909
112. K. Poznańska, A. Hola, R. Kozłowski, M. Strojceki, Ł. Bratasz "Mechanical and moisture-related properties of selected dried tempera paints", *Heritage Science*, 12(1) (2024) 25, DOI: 10.1186/s40494-024-01147-y
113. P.T. Prins, D. Rutkowska-Żbik, S. Pullen, B. Baumgartner "Porphyrins on acid: kinetics of the photoinduced-protonation of tetrakis(4-carboxyphenyl)-porphyrin", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 26 (2024) 24524-24532, DOI: 10.1039/d4cp02542c
114. S.W. Przemieniecki, K. Ruraż, O. Kosewska, M. Oćwieja, A. Gorczyca "The impact of various forms of silver nanoparticles on the rhizosphere of wheat (*Triticum aestivum* L.) – Shifts in microbiome structure and predicted microbial metabolic functions", *Science of the Total Environment*, 914 (2024) 169824, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2023.169824
115. D. Rutkowska-Zbik, A. Drzewiecka-Matuszek, R. Tokarz-Sobieraj "From single Cu atoms to sub-nanometric copper clusters deposited on TiO<sub>2</sub>: a DFT study", *Structural Chemistry*, 35 (2024) 1449-1459, DOI: 10.1007/s11224-024-02288-3
116. M. Saad, S. Bujok, K. Kruczała "Non-destructive detection and identification of plasticizers in PVC objects by means of machine learning-assisted Raman spectroscopy", *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 322 (2024) 124769, DOI: 10.1016/j.saa.2024.124769
117. M. Sadowska, M. Nattich-Rak, M. Morga, Z. Adamczyk, T. Basinska, D. Mickiewicz, M. Gadzinowski „Anisotropic Particle Deposition Kinetics from Quartz Crystal Microbalance Measurements: Beyond the Sphere Paradigm”, *Langmuir*, 40(15) (2024) 7907-7919, DOI: 10.1021/acs.langmuir.3c03676

118. S. Sahayaraj, R. Knura, K. Skibińska, Z. Starowicz, W. Bulowski, K. Gawlińska-Nęcek, P. Panek, M. Wojnicki, S. Iwanek, Ł. Majchrowicz, R.P. Socha "Tuning the Optical and Electrical Properties of ALD-Grown ZnO Films by Germanium Doping", *Materials*, 17(12) (2024) 2906, DOI: 10.3390/ma17122906
119. S. Skibiński, J.P. Czechowska, D. Milivojevic, J. Nikodinovic-Runic, M. Guzik, A. Zima "Silver and silicon doped  $\beta$ TCP scaffolds with gentamicin or ceftazidime loaded P(3HB) coatings as multifunctional biomaterials for bone regeneration", *Ceramics International*, 50(16) (2024) 28682-28695, DOI: 10.1016/j.ceramint.2024.05.178
120. M. Soboń, Ł. Bratasz "Risk of fracture in massive cultural objects made of lime wood: a case study of Veit Stoss' altarpiece", *Heritage Science*, 12(1) (2024) 214, DOI: 10.1186/s40494-024-01325-y
121. A. Solińska, T. Bajda, M. Gackowski "Sorption interactions and behavior of bentonite-lignite based composite toward immobilization of dyes, pharmaceuticals and surfactants", *Journal of Cleaner Production*, 473 (2024) 143555, DOI: 10.1016/j.jclepro.2024.143555
122. K. Sofińska, S. Seweryn, K. Skirlińska-Nosek, J. Barbasz, E. Lipiec "Tip-enhanced Raman spectroscopy reveals the structural rearrangements of tau protein aggregates at the growth phase", *Nanoscale*, 16(10) (2024) 5294-5301, DOI: 10.1039/d3nr06365h
123. K. Stankiewicz, P. Boroń, J. Prajsnar, M. Żelazny, M. Heliasz, W. Hunter, A. Lenart-Boroń "Second life of water and wastewater in the context of circular economy – Do the membrane bioreactor technology and storage reservoirs make the recycled water safe for further use?", *Science of the Total Environment*, 921 (2024) 170995, DOI: 10.1016/j.scitotenv.2024.170995
124. K. Starzak, W. Tomal, A. Chachaj-Brekiesz, M. Galek, J. Ortyl "Revealing the photoredox potential of azulene derivatives as panchromatic photoinitiators in various light-initiated polymerization processes", *Polymer Chemistry*, 15(29) (2024) 2931-2948, DOI: 10.1039/d4py00275j
125. A. Sultan, M.B. Hanif, M.Z. Khan, K. Zheng, M. Dudek, B.D. Napruszewska, W. Lasocha, P. Nowak, M. Motola "A critical investigation of the effect of silver migration at the silver | alumina scandia doped zirconia electrolyte interface in solid oxide fuel cell conditions", *Ceramics International*, 50(21) (2024) 42656-42667, DOI: 10.1016/j.ceramint.2024.08.109
126. M. Szaleniec, G. Oleksy, A. Sekuła, I. Aleksić, R. Pietras, M. Sarewicz, K. Krämer, A.J. Pierik, J. Heider "Modeling the Initiation Phase of the Catalytic Cycle in the Glycyl-Radical Enzyme Benzylsuccinate Synthase", *Journal of Physical Chemistry B*, 128(24) (2024) 5823-5839, DOI: 10.1021/acs.jpcb.4c01237
127. J. Szczepankowska, L. Woszczak, G. Khachatryan, K. Khachatryan, M. Krystyjan, A. Grzesiakowska, M. Kuchta-Gładysz, M. Krzan "Preparation and Physicochemical and Cytotoxic Characterisation of Polysaccharide Composites Containing Carbon Quantum Dots", *Materials*, 17(12) (2024) 2967, DOI: 10.3390/ma17122967
128. W. Szczęsna-Górniak, J. Weźgowiec, M. Tsirigotis-Maniecka, L. Szyk-Warszyńska, A. Michna, P. Warszyński, J. Saczko, K.A. Wilk "Physicochemical Features and Applicability of Newly Fabricated Phytopharmaceutical-Loaded Hydrogel Alginate Microcarriers with Viscoelastic Polyelectrolyte Coatings", *ChemPhysChem*, 25(4) (2024) e202300758, DOI: 10.1002/cphc.202300758

129. M. Szota, U. Szwedowicz, N. Rembiałkowska, A. Janicka-Klos, D. Doveiko, Y. Chen, J. Kulbacka, B. Jachimska "Dendrimer Platforms for Targeted Doxorubicin Delivery—Physicochemical Properties in Context of Biological Responses", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(13) (2024) 7201, DOI: 10.3390/ijms25137201
130. M. Szpytma, M. Ślęzak, W. Janus, H. Nayyef, T. Ślęzak, A. Mandziak, M. Zając, D. Wilgocka-Ślęzak, T.O. Menteş, M. Jugovac, A. Locatelli, A. Koziół-Rachwał "Transfer of magnetic anisotropy in epitaxial Co/NiO/Fe trilayers", *Scientific Reports*, 14(1) (2024) 1680, DOI: 10.1038/s41598-024-51896-w
131. M. Ślęzak, T. Wagner, V. Krishna Bharadwaj, O. Gomonay, A. Koziół-Rachwał, T. Onur Menteş, A. Locatelli, M. Zając, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Drózd, T. Ślęzak "From Magnetostatics to Topology: Antiferromagnetic Vortex States in NiO-Fe Nanostructures", *Advanced Materials Interfaces*, 11(31) (2024) 2400309, DOI: 10.1002/admi.202400309
132. D. Świąch, K. Kollbek, P. Jabłoński, M. Gajewska, G. Palumbo, M. Oćwieja, N. Piergies "Exploring the nanoscale: AFM-IR visualization of cysteine adsorption on gold nanoparticles", *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 318 (2024) 124433, DOI: 10.1016/j.saa.2024.124433
133. M. Tataruch, V. Illeová, A. Kluza, P. Cabadaj, M. Polakovič "Catalytic Stability of S-1-(4-Hydroxyphenyl)-Ethanol Dehydrogenase from *Aromatoleum aromaticum*", *International Journal of Molecular Sciences*, 25(13) (2024) 7385, DOI: 10.3390/ijms25137385
134. 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
135. Y. Wang, C. Dong, D. Hu, R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Zbik, K.B. Tayeb, A. Addad, V. Butenko, E.o de la Torre Miranda, M. Nghe Tran, P. Simon, O. Safonova, V. Briois, V.V. Ordonsky, A.Y. Khodakov "In-situ exploration of divergent methane coupling pathways in dry and aqueous environments on silver and palladium heteropolyacid-titania photocatalysts", *Applied Catalysis B: Environment and Energy*, 358 (2024) 124400, DOI: 10.1016/j.apcatb.2024.124400
136. Q. Wang, Y. Xu, J. Zawała, C. Liu, W. Xiao, S. Yang, "A novel interaction theory for the starch adsorption onto hematite surface", *Advanced Powder Technology*, 35(9) (2024) 104607, DOI: 10.1016/j.apt.2024.104607
137. K. Wojtacha-Rychter, M. Król, E. Lalik, M. Śliwa, P. Kucharski, M. Magdziarczyk, A.Smoliński "Experimental study of the new composite materials for thermochemical energy storage", *Energy*, 296 (2024) 131137, DOI: 10.1016/j.energy.2024.131137
138. A.M. Wojtkiewicz, G. Oleksy, M.A. Malinowska, T. Janeczko "Enzymatic synthesis of a skin active ingredient - glochidone by 3-ketosteroid dehydrogenase from *Sterolibacterium denitrificans*", *Journal of Steroid Biochemistry and Molecular Biology*, 241 (2024) 160513, DOI: 10.1016/j.jsbmb.2024.106513
139. P. Wolski, T. Panczyk "Insight Into Interfacial Behaviors between Doxorubicin and Zwitterion/PAMAM/CQD Hybrid Nanocarrier. A Molecular Dynamics Simulations Study", *The Journal of Physical Chemistry B*, 128(37) (2024) 8946-8955, DOI: 10.1021/acs.jpcc.4c05572
140. A. Wójcik-Augustyn, A.J. Johansson, T. Borowski "Reaction Mechanism Catalyzed by the Dissimilatory Sulfite Reductase – The Role of the Siroheme-[4FeS<sub>4</sub>] Cofactor", *ChemPhysChem*, 25(14) (2024) e202400327, DOI: 10.1002/cphc.202400327

141. A. Wróblewska, B. Szermer-Olearnik, A. Szczygieł, K. Węgierek-Ciura, J. Mierzejewska, D. Kozień, P. Żeliszewska, R. Kruszakin, P. Migdał, Z. Pędzich, E. Pajtasz-Piasecka "Macrophages as carriers of boron carbide nanoparticles dedicated to boron neutron capture therapy", *Journal of Nanobiotechnology*, 22(1) (2024) 183, DOI: 10.1186/s12951-024-02397-5
142. S.L. Zelinka, S.V. Glass, E.Q.D. Lazarcik, E.E. Thybring, M. Altgen, L. Rautkari, S. Curling, J. Cao, Y. Wang, T. Künniger, G. Nyström, C.H. Dreimol, I. Burgert, M.K.A. Uyup, T. Khadiran, M.G. Roper, D.P. Broom, M. Schwarzkopf, A. Yudhanto, M. Subah, G. Lubineau, M. Fredriksson, Marcin Strojceki, W. Olek, J. Majka, N.B. Pedersen, D.J. Burnett, A.R. Garcia, E. Verdonck, F. Dreisbach, L. Waguespack, J. Schott, L.G. Esteban, A. Garcia-Iruela, T. Colinart, R. Rémond, B. Mazian, P. Perre, L. Emmerich, L. Li "Interlaboratory study of the operational stability of automated sorption balances", *Adsorption*, 30(7) (2024) 1663-1674, DOI: 10.1007/s10450-024-00472-9
143. A. Zięba, K. Stan-Głowińska, D. Duraczyńska, L. Lityńska-Dobrzyńska "Rapidly solidified Al-Cu-Co quasicrystalline alloy: microstructure and catalytic properties", *Archives of Civil and Mechanical Engineering*, 24 (2024) 127, DOI: 10.1007/s43452-024-00904-x
144. A. Zięba, K. Stan-Głowińska, D. Duraczyńska, M. Marzec, A. Góral, P. Czaja, Ł. Rogal, L. Lityńska-Dobrzyńska "Al-Ni-Co decagonal quasicrystal application as an energy-effective catalyst for phenylacetylene hydrogenation", *Sustainable Materials and Technologies*, 41 (2024) e01055, DOI: 10.1016/j.susmat.2024.e01055
145. K. Zimowska, V. Filipovic, J. Nikodinovic-Runic, J. Simic, T. Ilic-Tomic, M. Zimowska, J. Gurgul, M. Ponjavic "Modulating the Release Kinetics of Natural Product Actinomycin from Bacterial Nanocellulose Films and Their Antimicrobial Activity", *Bioengineering*, 11(8) (2024) 847, DOI: 10.3390/bioengineering11080847
146. 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

## **PUBLIKACJE W CZASOPISMACH SPOZA LISTY MEiN**

1. K.A. Chałupka-Śpiewak, J. Gurgul, J. Grams, P. Mierczyński, W. Maniukiewicz, M.I. Szyrkowska-Jóźwik, K. Łątka, J. Rynkowski, S. Dźwigaj "The catalytic activity of bimetallic FeCoBEA zeolite catalysts in Fischer-Tropsch synthesis – the role of cobalt in framework position of dealuminated SiBEA zeolite", *Applied Catalysis O: Open*, 192 (2024) 206935, DOI: 10.1016/j.apcato.2024.206935

## **PUBLIKACJE NAUKOWE Z ROKIEM WYDANIA 2025**

1. P. Batys, L. Krzemień, J. Barbasz "dRama: Differential Ramachandran Plot as a Tool to Analyze Subtle Changes in Protein Secondary Structure", *Proteomics Clinical Applications*, 19(1) (2025) e202400087, DOI: 10.1002/prca.202400087
2. P.S. Bednarek, J. Zawala, P.B. Kowalczyk "Polymer-based collectors in flotation: A review", *Advances in Colloid and Interface Science*, 335 (2025) 103351, DOI: 10.1016/j.cis.2024.103351

3. P. Kumar, J.P. Thomas, D.S. Kharytonau, A. Gradone, N. Gilli, S. You, K. Tong Leung, V. Morandi, A. Vomiero "Cadmium-free electron transport layers for hydrothermally processed semitransparent Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> solar cells", *Nano Energy*, 134 (2025) 110539, DOI: 10.1016/j.nanoen.2024.110539
4. J. Maciejewska-Prończuk, M. Oćwieja, P. Żeliszewska, M. Wasilewska, D. Ungor, E. Csapó, L. Szyk-Warszyńska, M. Gajewska, A. Chrzanowska, J. Dobrzyńska, I. Ivashchenko, K. Matras-Postołek, Z. Adamczyk "Fluorescent gold nanoclusters stabilized by lysozyme: Synthesis and deposition kinetics on silica substrates", *Journal of Luminescence*, 277 (2025) 120912, DOI: 10.1016/j.jlumin.2024.120912
5. A. Michna, D. Lupa, W. Płaziński, P. Batys, Z. Adamczyk "Physicochemical characteristics of chitosan molecules: Modeling and experiments", *Advances in Colloid and Interface Science*, 337 (2025) 103383, DOI: 10.1016/j.cis.2024.103383
6. M. Mura, C. Carucci, E. Caddeo, Š. Sovová, M. Piludu, M. Pekař, B. Jachimska, D.F. Parsons, A. Salis "Specific buffer effects on the formation of BSA protein corona around amino-functionalized mesoporous silica nanoparticles", *Journal of Colloid and Interface Science*, 677 (2025) 540-547, DOI: 10.1016/j.jcis.2024.07.258
7. N. Piergies, M. Oćwieja, M. Sadowska, D. Duraczyńska, M. Nattich-Rak, B.D. Napruszewska "AFM–SEIRA nanospectroscopy imaging of the drug adsorption on the PtNP monolayers", *Measurement*, 239 (2025) 115329, DOI: 10.1016/j.measurement.2024.115329
8. W. Plazinski, A. Archala, K. Jozwiak, A. Plazinska "Unraveling the Structural Basis of Biased Agonism in the  $\beta$ 2-Adrenergic Receptor Through Molecular Dynamics Simulations", *Proteins-Structure Function And Bioinformatics*, (2025), DOI: 10.1002/prot.26766
9. D. Rutkowska-Zbik, V. Kaipanchery, R. Tokarz-Sobieraj "Single atom and sub-nanometer copper clusters deposited on titania for hydrogen evolution reaction: A density functional study", *Catalysis Today*, 446 (2025) 115142, DOI: 10.1016/j.cattod.2024.115142
10. P. Weroński "Spectral parametrization of random particle-packings", *Measurement*, 241 (2025) 115692, DOI: 10.1016/j.measurement.2024.115692
11. J. Żandarek, P. Żmudzki, D. Obradović, S. Lazović, A. Bogojević, A. Płazińska, W. Plazinski, T. Plech, M. Starek, M. Dąbrowska "Cefazolin and its photodegradation products – Prediction of pharmacokinetic profile and ecotoxicological potential", *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 13 (2025) 115084, DOI: 10.1016/j.jece.2024.115084

## STRESZCZENIA W MATERIAŁACH POKONFERENCYJNYCH

1. G. Antczak, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, B. Gołyszny, N. Spiridis "Identification of chirality of the organic molecular domains in the reciprocal space", *Book of Abstracts*, 37<sup>th</sup> European Conference on Surface Science (ECOSS-37), 17-21.06.2024 Harrogate, United Kingdom, p. 30
2. G. Antczak, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, B. Gołyszny, N. Spiridis "Identification of chirality of the organic molecular", *Book of Abstracts*, 10<sup>th</sup> International Workshop on Surface Physics, 22-26.09.2024 Niemcza, Poland, „Atoms, molecules and all other things at the surfaces...” (B. Pieczyrak, T. Ossowski, Eds.), Instytut Fizyki Doświadczalnej Uniwersytet Wrocławski, 2024, p.12 [ISBN 978-83-913497-5-5]

3. A. Baliś, G. Gochev, D. Truzzolillo, J. Zawala "Stabilization of W/W (PEG/DEX) emulsions by  $\beta$ -lactoglobulin nanogel particles: Influence of polymer molecular mass and particle size", Book of Abstracts, 19<sup>th</sup> Food Colloids Conference, 14-18.04.2024 Thessaloniki, Greece, p. 224
4. J. Barbasz "Innovative Metalworking System Based on Advanced Big Data Analysis", 33<sup>rd</sup> International Conference on Metallurgy and Materials, 22-25.05.2024 Brno, Czech Republic
5. J. Barbasz "Evaluation the multilayer scanner for LBC cytology using software with deep learning neural networks (UNet, VGG) and fuzzy logic approach", IGCS 2024 Annual Global Meeting, 16-18.10.2024 Dublin, Ireland, p.80
6. J. Barbasz, K. Sofińska, P. Bicz "Innovative Metalworking System Based on Advanced Big Data Analysis", Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 62, [ISBN 978-83-60514-38-2]
7. P. Batys, M. Morga, T. Kastinen, M. Khavani, I. Leszczyńska, S.M. Lalwani, C.I. Eneh, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi "Effect of Solvent Additives on Polyelectrolyte Physicochemical Properties and Complexation", Book of Abstracts, Polymers 2024 International Joint Conference, 06-08.03.2024 Sevilla, Spain, p. 63
8. S. Baumgart, D. Kupczyk, M. Przybysz, W. Płaziński, R. Studzińska "Spiro-cycloalkyl 2-aminothiazol -4(5H)-one Derivatives as selective 11 $\beta$ -HSD1 inhibitors", Book of Abstracts, 3<sup>rd</sup> International Conference "Chemistry for beauty and health", 13-15.06.2024 Kraków, (M. Malinowska, E. Sikora, Eds.), Politechnika Krakowska, Kraków 2024, p. 40, [eISBN 978-83-955526-6-3]
9. Ł. Berger, S. Bujok, M. Strojcki, M. Soboń, S. Antropov, R. Kozłowski, E. Hagan, D. Thickett, Ł. Bratasz "HERIe – digital preventive conservation platform", 6<sup>th</sup> International Conference on Innovation in Art Research and Technology – InART2024, 04-07.06.2024 Oslo, Norway, Museum of Cultural History, University of Oslo2024, pp. 20-21, [ISBN 978-1-80327-742-4]
10. B. Blyzniuk, A. Dziwoki, K. Freindl, Ewa Madej, E. Młynczak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, N. Spiridis "True resistivity in magnetite epitaxial ultra-thin films", Book of Abstracts, 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 07-12.07.2024 Perugia, Italy, p. 125
11. Ł. Bratasz "When Chemistry Meets Other Disciplines in Heritage Science", Abstract Proceedings, 7<sup>th</sup> International Congress Chemistry for Cultural Heritage 2024 (CHEMCH 2024), 02-05.07.2024 Bratislava, Slovakia (K. Vizárová, R. Tiño, K. Kučíková, M. Reháková, Eds.), 1. edition, Slovak Chemistry Library FCHPT STU in Bratislava, pp.18-19, [ISBN: 978-80-8208-124-7]
12. S. Bujok, T. Pańczyk, K. Szutkowski, D. Anioł, S. Antropov, K. Kruczała, Ł. Bratasz „Migracja plastifikatorów w obiektach dziedzictwa wykonanych z poli(chlorku winylu): aspekty mechaniczne i środowiskowe”, Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków AChwOZ’XXIV, 28-29.11.2024 Warszawa, p. 30
13. M. Bury, S. Antropov, A. Janas, Ł. Bratasz „Rozwój spękań w obrazach na płótnie”, Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, AChwOZ’XXIV, 28-29.11.2024 Warszawa, p. 13

14. K. A. Chałupka-Śpiewak, R. Sadek, W. Maniukiewicz, P. Mierczyński, M. I. Szynkowska-Jóźwik, J. Rynkowski, J. Gurgul, S. Dźwigaj "Fischer-Tropsch synthesis – old way to the alternative fuel production with the new heterogeneous catalysts", Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 29, [ISBN 978-83-60514-37-5]
15. A. Drzewiecka-Matuszek, J. Dedecek, D. Rutkowska-Zbik "Exploring metal cooperativity in O<sub>2</sub> activation by binuclear transition metal sites", Book of Abstracts, Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland, p. 55
16. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Zbik "Small molecules binding by (M-Por)<sub>2</sub> dimers (M = Fe, Ni, Mn, Co): DFT Studies", Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 60, [ISBN 978-83-60514-37-5]
17. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Zbik "Cooperativity of binuclear transition metal sites - N<sub>2</sub>O activation", Book of Abstracts, Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland, p.101
18. A. Drzewiecka-Matuszek, K. Samson, M. Smoliło-Utrata, A. Kornas, R. Kosydar, M. Śliwa, E. Tabor, K. Mlekodaj, S. Sklenak, J. Dedecek, D. Rutkowska-Zbik „Współ w zespół, by moc móc wzmóc, czyli współdziałanie centrów metalicznych”, Materiały zjazdowe streszczenia, 66 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 143
19. A. Faruga, J. Prajsnar, R. Karcz, M. Guzik "Upgrading bioplastic via a fermentation process", Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 83, [ISBN 978-83-60514-39-9]
20. M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk „Physical mixing as a simple and effective method of introducing ibuprofen into mesopores”, Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 41, [ISBN 978-83-60514-37-5]
21. M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska "Diffusion of ibuprofen molecules into mesopores of SBA-15 material", XXIV Zeolite Forum, 04-08.06.2024 Będlewo, p. 40, [ISBN 978-83-62783-19-9]
22. G. Gochev, E.V. Aksenenko, V.I. Kovalchuk, L. Szyk-Warszyńska, D. Gawel, J. Zawała, P. Warszyński, E. Schneck, R. Miller, V.B. Fainerman "Current view on the adsorption dynamics of bovine serum albumin at water/air interface", Book of Abstracts, 19<sup>th</sup> Food Colloids Conference, 14-17.04.2024 Thessaloniki, Greece, p. 68
23. B. Gołyszny, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, G. Antczak „LEEM and PEEM investigation of structural and electronic properties of F16CuPc thin films on Ag (100) surfaces”, Book of Abstracts, 37<sup>th</sup> European Conference on Surface Science (ECOSS-37), 17-21.06.2024 Harrogate, United Kingdom, p. 93

24. B. Gołyszny, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, G. Antczak "LEEM and PEEM investigation of ultrathin F16CuPc films on Ag (100) surfaces", Book of Abstracts, 10th International Workshop on Surface Physics, 22-26.09.2024 Niemcza, Poland, „Atoms, molecules and all other things at the surfaces...” (B. Pieczyrak, T. Ossowski, Eds.), Instytut Fizyki Doświadczalnej Uniwersytet Wrocławski, 2024, p.18 [ISBN 978-83-913497-5-5]
25. K. Górecki, S. Bujok, Ł. Bratasz, K. Kruczała "The effect of plasticiser type on the thermal degradation of poly(vinyl chloride): multimodal spectroscopic analysis", Book of Abstracts, MoDeSt 2024: 11<sup>th</sup> Conference of the Modification, Degradation, Stabilization of Polymers Society, 01-04.09.2024 Palermo, Italy, p. 317-318
26. K. Górecki, S. Bujok, K. Kruczała „Understanding the Thermal Degradation of Poly(vinyl chloride) Plasticisers– a Case Study of Key Representatives”, Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 43, [ISBN 978-83-60514-37-5]
27. B. Grygier, K. Kamińska, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, W. Lasoń, A. Basta-Kaim „Wpływ wolnego ederavonu i ederavonu zamkniętego w nanokapsułkach na hodowlę organotypowe hipokampa w modelu udaru niedokrwienno mózgu”, Książka abstraktów Pierwsze Dni Farmakologii Polskiej, 26-29.05.2024 Ustroń-Jaszowiec, p. 56, [ISBN 978-83-908945-2-2]
28. E. Gumieniczek-Chłopek, J. Odrobińska-Baliś, G. Opiła, S. Zapotoczny, C. Kapusta „Magnetically Controlled Smart Delivery Systems based on Polysaccharides Capsules”, Abstract Book, Madeira International Conference on Emerging Trends and Future of Nanomaterials for Human Health (Mad-Nano24), 28-30.11.2024 Funchal, Madeira Island, Portugal, (J. Rodrigues, M. Gonçalves, E. Freitas, Eds.) p. 64, [ISBN: 978-989-54090-9-9]
29. M. Guzik, K. Haraźna, J. Prajsnar, W. Snoch “Polyhydroxyalkanoates – sustainable biopolymers for innovative chemical and material synthesis”, Book of Abstracts, Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków Poland, p. 48
30. M. Guzik, A. Bojarski, R. Bugno, J. Staroń, K. Stępień-Hołubczat, J. Kryściak-Czerwenka, J. Prajsnar “ Development of Chemical and Enzymatic Pathways for Modifying the Amino Group of 6-Aminopenicillanic Acid by Introducing Bacterial-Derived 3-Hydroxyacids into the Molecule”, Book of Abstracts, 6th Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 49, [ISBN 978-83-60514-39-9]
31. O. Hotsanoha, K. Szczepanowicz, T. Kruk „Formowanie, modyfikacja i osadzanie tlenku grafenu (GO) oraz hybryd GO z polielektrolitami/nanocząstkami metalicznymi na powierzchni złota”, Materiały konferencyjne, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano (&) BioMateriały - od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń, p. 81
32. M. Husain, D. Rutkowska-Zbik, T. Korona „Zastosowanie metod topologii kwantowej do opisu stanów wzbudzonych porfiryń”, Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 478

33. M. Husain, D. Rutkowska-Żbik, T. Korona “Exploring the excitation effects of fluorine and cobalt substitution on porphine using quantum chemistry topology”, Book of Abstracts, Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland, p. 100
34. M. Jamroży, M. Krzan „Opracowanie nowoczesnych biosurfaktantów na bazie saponiny”, Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Bliżej Chemii”, 12-13.01.2024 Kraków, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie (UJ), Kraków 2024
35. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, M. Krzan „Badanie wpływu powierzchniowych wiązań wodorowych na aktywność i dylatacyjną elastyczność powierzchniową mieszanin saponiny”, Book of abstracts, Ogólnopolska Konferencja Interdyscyplinarna "ALFA I OMEGA CZ. XIV", 14-15.03.2024 Kraków, p. 20, [ISBN 978-83-63216-93-1]
36. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, M. Krzan „Analiza wpływu powierzchniowych wiązań wodorowych na aktywność i dylatacyjną elastyczność powierzchniową mieszanin saponiny”, Abstrakty, XVI Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2024 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, 21-24.03.2024 Lublin (P. Pomajda, K. Maciąg, Eds.), Fundacja na rzecz promocji nauki i rozwoju TYGIEL, Lublin 2024, p. 105, [ISBN 978-83-67670-53-1]
37. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, M. Krzan “Modern saponin-based biosurfactants as an alternative to the currently used detergents”, The Book of Abstracts, National Scientific Conference „e-Factory of Science” XI edition, 06.04.2024 Łódź (A. Firaza, N. Kępczak, P. Byczkowska, Eds), Promovendi Foundation Publishing, Łódź 2024, p. 54, [ISBN 978-83-967915-6-6]
38. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Krzan “Exploring the Influence of Interfacial Hydrogen Bonding on Surface Properties and Foam Stability in Saponin Mixtures”, Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 57, [ISBN 978-83-60514-39-9]
39. P.J. Jodłowski, K. Dymek, G. Kurowski, K. Hyjek, A. Boguszevska-Czubara, B. Budzyńska, A. Pajdak, Ł. Kuterasiński, W. Piskorz, P. Jeleń, M. Sitarz “Biological studies of efficient mephedrone adsorption over Zr-based metal-organic frameworks”, XXIV Zeolite Forum, 04-08.06.2024 Będlewo, p. 20, [ISBN 978-83-62783-19-9]
40. J. Kaim, M. Śliwa, Ł. Kuterasiński, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska, G. Mordarski, R. Karcz, D. Rutkowska-Żbik “Gas-phase hydrogenation and decarbonylation of furfuryl aldehyde over catalysts containing Cu and Ni”, Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 78, [ISBN 978-83-60514-37-5]
41. K. Kamińska, B. Grygier, E. Trojan, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, W. Lasoń, A. Basta-Kaim “Influence of cyclosporin A, free and loaded in theranostic nanocarriers on the oxygen-glucose deprivation-induced cell damage in organotypic hippocampal cultures”, Abstracts, 37<sup>th</sup> ECNP Congress 2024, 21-24-09.2024 Milan, Italy, Neuroscience Applied 3 (2024) 104096, p.499

42. A. Kamińska, Ł. Luśtyk, J. Gurgul, B. Jachimska "Comparison conformational stability of lysozyme adsorbed on the gold surface and artificial lipid membranę", Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 52, [ISBN 978-83-60514-38-2]
43. D.S. Kharytonau, E. Jarek, K. Skowron, M. Zimowska, I. Dobryden, N. Almqvist "Corrosion and nanomechanical properties of Mo-coordinated chitosan coatings on Mg alloy WE43", Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 73, [ISBN 978-83-60514-38-2]
44. D.S. Kharytonau, G. Mordarski, K. Skowron, V. Chaprasava, E. Jarek, M. Zimowska, N. Almqvist "Corrosion performance and nanomechanical properties of polylactic acid coatings on WE43 magnesium alloy", Book of Abstracts, 7th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 87, [ISBN 978-83-60514-38-2]
45. D. S. Kharytonau, M. A. Osipenko, J. Ryl, J. Adamiec, K. Skowron, I. I. Kurilo, N. Almqvist "Effect of permanganate ions on corrosion inhibition of Mg-Al-Zn alloys containing different amounts of Li", Book of Abstracts, 7th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 48, [ISBN 978-83-60514-38-2]
46. K. Kieca, M. Oszejca, D. Rutkowska-Żbik, G. Stochel „Badania mechanizmu S-nitrozacji z udziałem modelowych żelazo(III)-porfiryń”, Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 159
47. W. Kieres, M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Krzan "Interactions of saponins at the water-air and water-oil interfaces with chemical compounds as donors or acceptors of hydrogen bonds and their role in emulsion stabilization", Book of Abstracts, 3<sup>rd</sup> International Conference "Chemistry for beauty and health", 13-15.06.2024 Kraków, (M. Malinowska, E. Sikora, Eds.), Politechnika Krakowska, Kraków 2024 p. 58, [eISBN 978-83-955526-6-3]
48. W. Kieres, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Jamroży, M. Krzan "Interactions of Saponin with Hydrogen Bond Donor or Acceptor Compounds at Water-Air and Water-Oil Interfaces: Influence on Emulsion Stability", Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 87, [ISBN 978-83-60514-39-9]
49. W. Kieres, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Krzan „Interakcje saponiny ze związkami chemicznymi pełniącymi funkcję donorów lub akceptorów wiązań wodorowych na granicy faz woda-powietrze oraz ich wpływ na stabilność emulsji”, Book of abstracts, Ogólnopolska Konferencja Interdyscyplinarna pn: "ALFA I OMEGA CZ. XVI" Nauki Interdyscyplinarne, 19-20.09.2024 Kraków, p. 66, [ISBN 978-83-68082-01-2]

50. J. Klęba, D. Duraczyńska, K. Zheng, M. Fedyna, J. Mokrzycki "The effect of copper(II) salt precursors on HKUST-1 physicochemical properties and removal of trivalent chromium ions from aqueous solutions", Book of Abstracts, International Conference Energy Fuels Environment (EFE2024), 26-28.06.2024 Kraków, Poland, p. 92
51. A. Kornas, E. Tabor, J. Dedecek, K. Mlekodaj, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Smoliło-Utrata, K. Samson, M. Śliwa, D. Rutkowska-Żbik "DFT studies of O<sub>2</sub> activation by Fe, Ni, and Co bi-metallic sites for valorization of C1-C3 alkanes", Book of Abstracts, International Symposium Catalytic Chemistry of C1 Molecules, C1Chem, 10-12.07.2024 Lille, France, p. 110
52. D. Kosior, G. Gochev, P. Batys, Ł. Witkowski, P. Warszyński, J. Zawala „Efekt par organicznych na właściwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz w warunkach statycznych i dynamicznych”, XI Konferencja Naukowa "Innowacje w praktyce", 06-07.06.2024 Lublin, p. 106, [ISBN 978-83-943796-9-8]
53. R. Kosydar, E. Lalik, D. Duraczyńska, J. Gurgul, T. Szumelda, A. Drelinkiewicz "The activity of bimetallic PdIr/C and monometallic Ir/C catalysts for the conversion of furfural via its hydrogenation and acetalization", Book of Abstracts, Challenges on the Renewable Energy Storage, 01-04.09.2024 Liblice, Czech Republic, p. 28-29
54. P. Kozioł, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz, R. Dziedzic „Laserowe spiekanie nanocząstek bimetalicznych Ni-Ag do zastosowania w nowoczesnej elektronice”, Materiały konferencyjne, XIV Sympozjum Techniki Laserowej, 09-13.09.2024 Zamek Ryn (R. Piramidowicz, K. Anders, Eds.), Instytut Mikroelektroniki i Optoelektroniki Politechniki Warszawskiej, P-50, [ISBN 978-83-64102-06-6]
55. K. Kruczała, M. Saad, M. Bucki, S. Bujok, D. Pawcenis, T. Rijavec, K. Górecki, Ł. Bratasz, I. Kralj Cigić, M. Strlič "Towards the understanding of the thermal degradation behavior of the rigid and plasticized poly(vinyl chloride)", Book of Abstracts, MoDeSt 2024: 11th conference of the Modification, Degradation, Stabilization of Polymers Society, 01-04.09.2024 Palermo, Italy, p. 85-86
56. K. Kruczała, M. Bucki, M. Saad, K. Górecki, D. Pawcenis, S. Bujok, Ł. Bratasz "Effects of Artificial Ageing on Plasticized Poly(vinyl chloride)", Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 70, [ISBN 978-83-60514-37-5]
57. T. Kruk, O. Hotsanoha, K. Szczepanowicz „Modyfikacja i osadzanie tlenku grafenu (GO) oraz hybryd GO z polielektrolitami/nanocząstkami metalicznymi na powierzchni złota jako platforma zwiększająca czułość oraz stabilność dla nowego typu immunosensorów”, Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 341
58. T. Kruk, O. Hotsanoha, K. Szczepanowicz "Modification and deposition of graphene oxide (GO) on gold surface as a platform increasing sensitivity and stability for a new type of immunosensors", NanoBio&Med2024 International Conference, 05-07.11.2024 Barcelona, Hiszpania, p. 84

59. T. Kruk, R. Meenambal, K. Jakubowska, J. Gurgul, K. Szczepanowicz, M. Szczęch, L. Szyk-Warszyńska, N. Łopuszyńska, K. Stachurski, W. P. Węglarz, D. Jantas, P. Warszyński „Wpływ domieszkowania lantanowcami na właściwości fizykochemiczne i potencjał neuroprotektynowy nanocząstek tlenku ceru funkcjonalizowanych kwasem poliakrylowym”, Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 504
60. M. Krzan, W. Kieres, M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, P. Warszyński “Adsorption of saponin at water-air and water-oil interfaces in the presence of chemical compounds that are hydrogen bond donors or acceptors and their effect on the emulsion stability”, Book of Abstracts, 15<sup>th</sup> European Foam Conference (EUFOAM), 30.06-04.07.2024 Dresden, Germany, p. 72
61. M. Krzan, M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, P. Warszyński “The effect of interfacial hydrogen bonding on the surface properties and foam stability in saponin mixtures”, Book of Abstracts, 15<sup>th</sup> European Foam Conference (EUFOAM), 30.06-04.07.2024 Dresden, Germany, p. 38
62. M. Krzan, P. Warszyński “Mechanism of saponin-chitosan complexes formation – a molecular dynamics study”, Book of Abstracts, 15<sup>th</sup> European Foam Conference (EUFOAM), 30.06-04.07.2024 Dresden, Germany, p. 76
63. Ł. Kuterasiński, A. Biessikowski, S. G. Atlagić, M. Pytlik, M. Dworzak, M. Twardosz, M. Cała, J. Jakóbczyk, S. Sukur, A. Stopkowicz, A. Baziak, B. D. Napruszewska “On the influence of the iron content in microstructured charcoal additives on the physicochemical properties of ANFO-based explosives”, Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), I KiFP PAN, Kraków 2024, p. 71, [ISBN 978-83-60514-37-5]
64. Ł. Kuterasiński, A. Biessikowski, S. G. Atlagić, M. Pytlik, M. Dworzak, M. Twardosz, M. Cała, J. Jakóbczyk, S. Sukur, A. Stopkowicz, A. Baziak, B. D. Napruszewska “On the influence of the iron content in microstructured charcoal additives on the physicochemical properties of ANFO-based explosives”, XXIV Zeolite Forum, 04-08.06.2024 Będlewo, p. 47, [ISBN 978-83-62783-19-9]
65. N. Kwiatek, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzaka, K. Freindl, M. Zając, J. Korecki, N. Spiridis “Correlations of chemical and magnetic properties in cobalt/magnetite and cobalt/hematite epitaxial heterostructures” 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 07-12.07.2024 Perugia, Italy, p. 130
66. K.J. Legawiec, M. Kruszelnicki, P. Basařová, M. Basařová, J. Zawała, I. Polowczyk “Sustainable flotation solutions: Investigating the impact of biological origin surfactants on bubble-particle interactions”, Book of Abstracts, Sustainable flotation solutions: Investigating the impact of biological origin surfactants on bubble-particle interactions, 17-18.06.2024 Dresden, Germany, p. ID 75
67. A.M. Leshansky, B. Y. Rubinstein, I. Fouxon, M. Sadowska, D. Johannsmann, Z. Adamczyk “Quartz crystal microbalance (QCM) frequency response to discrete adsorbates in liquids”, Abstract Book, 26<sup>th</sup> International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2024), 25-30.08.2024 Daegu, Korea, KCTAM, 2024 [ISBN 9791198476098]

68. E. Madej, K. Freindl, J. Korecki, N. Kwiatek<sup>1</sup>, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis “Switching of Néel vector in hematite thin films by exchange coupling with cobalt layers”, Book of abstracts, 13<sup>th</sup> conference on Low-Energy and Photoemission Electron Microscopies LEEM-PEEM13, 19-23.08.2024 Montréal, Canada, p. 49
69. E. Madej, K. Freindl, J. Korecki, N. Kwiatek, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis “Switching of Néel vector in hematite thin films by exchange coupling with cobalt layers”, Book of abstracts, 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 7-12.07.2024 Perugia, Italy, p. 60
70. E. Madej, K. Freindl, J. Korecki, N. Kwiatek, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis “How PEEM helps in the study of antiferromagnets?”, Joint Meeting of Polish Synchrotron Radiation Society and Solaris Centre Users, 11-13.09.2024 Krakow, Poland, Bulletin of Polish Synchrotron Radiation Society, vol. 24, September 2024, p. 30 [ISSN 1644-7190]
71. M. Matczak, B. Anastaziak, M. Kowacz, M. Urbaniak, D. Kiphart, F. Stobiecki, A. Mandziak, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Kuświk, “Tailoring magnetic properties of Co/Ni bilayers by plasma oxidation”, Book of abstracts, 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 7-12.07.2024 Perugia, Italy, p. 40
72. M. Matczak, B. Anastaziak, M. Kowacz, M. Urbaniak, D. Kiphart, F. Stobiecki, A. Mandziak, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Kuświk “Tailoring magnetic properties of Co/Ni bilayers by plasma oxidation”, Book of abstracts, 2D Quantum Materials for Spintronics, 2DQMS, 29-31.01.2024 Poznań, Poland, p. 16
73. R. Meenambal, K. Jakubowska, T. Kruk, P. Warszyński, D. Jantas “Probe into neuroprotective effects of polyacrylic acid (PAA)-conjugated cerium oxide against MPP<sup>+</sup>-induced cell damage in SH-SY5Y cells”, Abstracts from the Conference, 16<sup>th</sup> International Symposium “Molecular basis of pathology and therapy in neurological disorders, 17-18.10.2024 Warszawa, Folia Neuropathologica 62 (2024) 4, p. 490
74. A. Micek-Ilnicka, N. Ogrodowicz, M. Zimowska, E. Lalik, M. Ruggiero-Mikołajczyk „Niekonwencjonalna metoda badania kwasowości stałych katalizatorów GC vs. IR vs. mikrokalorymetria”, Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), I KiFP PAN, Kraków 2024, p. 86, [ISBN 978-83-60514-37-5]
75. A. Michna, P. Batys, M. Dąbkowska, B. Kowalski, A. Pomorska, M. Wasilewska, Z. Adamczyk “Fibroblast Growth Factor 21 Adsorption on Polyelectrolyte Layers: Modelling and Experimental Studies”, Book of Abstracts, Polymers 2024, Composites 2024 and 3BS Materials 2024 International Joint Conference, 06-08.03.2024 Seville, Spain, p. 49
76. J. Mierzejewska, S. Cudziło, B. Szermer-Olearnik, A. Wróblewska, A. Szczygieł, P. Żeliszewska, K. Węgierek-Ciura, A. Rapak, E. Pajtasz-Piasecka „Functionalized boron nitride nanoparticles as boron carriers in boron neutron capture therapy”, Abstract Book, 20th International Congress on Neutron Capture Therapy (ICNCT 20), 24-28.06.2024 Kraków, Poland, p. 171

77. E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, A. Surendran, S. Shaju, N. Spiridis "Structural and electronic properties of ultrathin Sn deposited on Pt(111) studied by low energy electron microscopy", Book of Abstracts, 37<sup>th</sup> European Conference on Surface Science (ECOSS-37), 17-21.06.2024 Harrogate, United Kingdom, p 148
78. E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, A. Surendran, S. Shaju, G. Bihlmayer, N. Spiridis "Ultrathin Sn deposited on Pt(111): growth and electronic structure", Joint Meeting of Polish Synchrotron Radiation Society and Solaris Centre Users, 11-13.09.2024 Krakow, Poland, Bulletin of Polish Synchrotron Radiation Society, vol. 24, September 2024, p. 31 [ISSN 1644-7190]
79. E. Mlynczak, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, A. Surendran, S. Shaju, N. Spiridis "Structural and electronic properties of ultrathin Sn deposited on Pt(111) studied by low energy electron microscopy", Book of abstracts, 13<sup>th</sup> conference on Low-Energy and Photoemission Electron Microscopies LEEM-PEEM13, 19-23.08.2024 Montréal, Canada, p. 41
80. J. Mokrzycki, M. Guzik, J. Kryściak-Czerwenka, D. Duraczyńska, R. Karcz "Cryptomelane (K-OMS-2) enriched with copper as efficient catalysts for toluene combustion", Book of Abstracts, International Conference Energy Fuels Environment (EFE2024), 26-28.06.2024 Kraków, Poland, p. 112
81. M. Morga, P. Batys, D. Kosior, A. Harmat, T. Kastinen, P. Bonarek, D. Lupa, Z. Adamczyk, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi "Influence of external factors on the structure of poly-L-lysine (PLL) and poly-L-glutamic acid (PGA) and formation of PLL/PGA complexes", Book of Abstracts, Polymers 2024 International Joint Conference, 06-08.03.2024 Sevilla, Spain, p. 64
82. M. Oćwieja, P. Smoleń, A. Barbasz, N. Piergies „The impact of gallic and rosmarinic acid on the physicochemical and biological properties of selected metal nanoparticles”, XI Conference of Nanotechnology, 30.06-05.07.2024 Lublin, Poland, p. 100
83. M. Oćwieja, A. Barbasz, P. Smoleń, M. Wasilewska, D. Duraczyńska, B.D. Napruszewska, A. Węgrzynowicz „Aktywność biologiczna nanocząstek srebra modulowana ich ładunkiem powierzchniowym”, Materiały konferencyjne, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały - od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń, p.54
84. J. Odrobińska-Baliś, M. Procner, K. Krużel, M. Regulska, M. Leśkiewicz, S. Zapotoczny, W. Lasoń, W. Węglarz, K. Szczepanowicz "Chitosan-based nanocapsules as a multifunctional drug delivery system", Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 305
85. G. Oleksy, M. Szaleniec, I. Aleksic. K. Krämer, J. Heider " Unraveling the catalytic properties of benzylsuccinate synthase from a novel toluene-degrading strain *Aromatoleum sp.*", Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 45, [ISBN 978-83-60514-39-9]

86. A. Pacuła, J. Gurgul, P. Pietrzyk, J. Dobrzyńska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, D. Duraczyńska "Electrocatalysts, adsorbents for arsenic removal and components for polymer composite membranes based on pyrolytic carbon deposited on metals/metal oxides derived from hydrotalcite-like materials", Book of Abstracts, The 11<sup>th</sup> Torunian Carbon Symposium Copernican revolution in carbon science (TCS 2024), 15-18.09.2024 Toruń, p. 15
87. A. Pajor-Świerzy, K. Kozak, D. Duraczyńska, K. Szczepanowicz "The conductive materials based on nickel@silver core@shell nanoparticles for application in the printed electronic industry", Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 350
88. A. Pajor-Świerzy, K. Kozak, D. Duraczyńska, A. Wiertel-Pochopień, J. Zawała, K. Szczepanowicz "Effect of silver shell thickness on conductivity of coatings based on nickel-silver core-shell nanoparticles", Book of Abstracts, NanoTech Poland 2024 14<sup>th</sup> International Conference, 05-07.06.2024 Poznań, Poland, p. 27
89. A. Pajor-Świerzy, K. Kozak, L. Szyk-Warszyńska, D. Duraczyńska, K. Szczepanowicz "Fabrication of Conductive Coatings Based on Nickel@Silver Core@Shell Nanoparticles by Low-Temperature Sintering Methods", Book of Abstracts, 5<sup>th</sup> International Conference on Nanomaterials, Nanofabrication and Nanocharacterization (NANOMACH 2024), 18-24.04.2024 Oludeniz, Turkiye, Id-856
90. A. Pajor-Świerzy, L. Szyk-Warszyńska, D. Duraczyńska, K. Szczepanowicz "UV-Vis sintering process of coatings based on nickel-silver core-shell nanoparticles for fabrication of printed flexible electronics", Book of Abstracts, 24<sup>th</sup> IEEE International Conference on Nanotechnology, 8-11.07.2024 Gijón, Spain
91. B. Pantelic, C. Venkateswara Rao, J. Nikodinovic-Runic, T. Ilic-Tomic, D. Milivojevic, M. Guzik, M. Ponjavic "Development and characterization of novel biobased polyurethane films reinforced with bacterial biomass", Compiled Poster Abstract Booklet, 19th International Symposium on Biopolymers (ISBP 2024), 20-24.10.2024 Penang Island, Malaysia, p. 38
92. T. Pańczyk „Degradacja politereftalanu etylenu (PET) badana przy użyciu reaktywnej dynamiki molekularnej”, XI Konferencja Naukowa "Innowacje w praktyce", 06-07.06.2024 Lublin, p. 43, [ISBN 978-83-943796-9-8]
93. T. Pańczyk "Modeling Plastic Degradation Using Shock Compression and Reactive Molecular Dynamics", IX Polymer Science and Technology Congress with International Participation, PolymerTR, 16-19.09.2024 Ankara, Türkiye, p.55
94. T. Pańczyk, K. Nieszorek, P. Wolski "Surface Chemistry of Degraded Polyethylene Terephthalate (PET): Insights from Reactive Molecular Dynamics Study", Polymer Degradation Discussion Group, 35<sup>th</sup> PDDG, 23-26.06.2024 Limassol, Cypr, p. 9
95. Z. Pędzich, D. Kozień, A. Wojteczko, B. Szermer-Olearnik, P. Żeliszewska, Z. Adamczyk, A. Wróblewska, A. Szczygieł, K. Węgierek-Ciura, K. Krygowska, J. Mierzejewska, E. Pajtasz-Piasecka „Various methods of synthesis and determination of the potential for use of boron carbide in BNCT therapy”, Abstract Book, 20<sup>th</sup> International Congress on Neutron Capture Therapy (ICNCT 20), 24-28.06.2024 Kraków, Poland, p. 55

96. K. Piechowska, M. Mizerska-Kowalska, B. Zdzisińska, J. Cytarska, A. Baranowska-Łączkowska, K. Jaroń, K. Łuczykowski, W. Płaziński, B. Bojko, S. Kruszewski, K. Misiura, K.Z. Łączkowski "Tropinone-thiazole derivatives as anticancer agents", Book of Abstracts, 3<sup>rd</sup> International Conference "Chemistry for beauty and health", 13-15.06.2024 Kraków, (M. Malinowska, E. Sikora, Eds.), Politechnika Krakowska, Kraków 2024, p. 39, [eISBN 978-83-955526-6-3]
97. N. Piergies, M. Oćwieja, K. Pogoda, K. Cieżak, M. Roman, W.M. Kwiatek "Effectiveness of the metal nanoparticles as drug carriers in in vitro model of non-small cell lung cancer. Infrared micro- and nano-spectroscopy approaches", Eu-NanoSpec European Meeting on InfraRed NanoSpectro-Imaging, 12-15.03.2024 Orsay, France, p.12
98. J. Podobiński, M. Śliwa, Ł. Kuterasiński, J. Datka "Quantitative IR studies of basic sites on catalysts", XXIV Zeolite Forum, 04-08.06.2024 Będlewo, p. 53, [ISBN 978-83-62783-19-9]
99. K. Poznańska, S. Bujok, Ł. Bratasz "Dynamic mechanical properties of heritage materials", Abstract Proceedings, 7<sup>th</sup> International Congress Chemistry for Cultural Heritage 2024 (CHEMCH 2024), 02-05.07.2024 Bratislava, Slovakia (K. Vizárová, R. Tiňo, K. Kučíková, M. Reháková, Eds.), 1. edition, Slovak Chemistry Library FCHPT STU in Bratislava, pp.20-21, [ISBN: 978-80-8208-124-7]
100. J. Prajsnar, W. Snoch, R. Bugno, K. Stępień, M. Guzik "PHA monomers in the biosynthesis of small biologically active molecules", Compiled Poster Abstract Booklet, 19<sup>th</sup> International Symposium on Biopolymers (ISBP 2024), 20-24.10.2024 Penang Island, Malaysia, p. 54
101. M. Prochner, M. Szczęch, M. Regulska, M. Leśkiewicz, W. Lasoń, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Polymeric-based nanocarriers for delivery of neuroprotective drugs through blood-brain barrier", Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 223
102. M. Prochner, M. Szczęch, M. Regulska, M. Leśkiewicz, W. Lasoń, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Multilayer nanocarriers - a promising tool for delivery of neuroprotective drugs through blood-brain barrier", NanoBio&Med2024 International Conference, 05-07.11.2024 Barcelona, Hiszpania, p. 57
103. A. Przybyłowicz, S. Kudłacik-Kramarczyk, W. Kieres, A. Drabczyk, M. Krzan „Oleozele na bazie oleju lnianego jako potencjalne nośniki leków hydrofobowych - badania fizykochemiczne i zastosowanie”, Book of abstracts, Ogólnopolska Konferencja Interdyscyplinarna pn: „COGITO CZ. XIV”, 01-02.08.2024 Kraków, p. 50, [ISBN 978-83-63216-98-6]
104. A. Przybyłowicz, S. Kudłacik-Kramarczyk, W. Kieres, A. Drabczyk, M. Krzan „Wosk pszczelel w farmacji naturalnej - jego rola w oleożelach terapeutycznych”, Book of abstracts, Ogólnopolska Konferencja Interdyscyplinarna pn: "ALFA I OMEGA CZ. XVI" Nauki Interdyscyplinarne, 19-20.09.2024 Kraków, p. 63, [ISBN 978-83-68082-01-2]
105. M. Rak, T. Kruk, D. Janstas, K. Szczepanowicz „Polielektrolitowe nanonośniki substancji aktywnych”, Materiały konferencyjne, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały - od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń, p. 56
106. K. Rakowski, B. Jachimska "Monitoring the interaction of  $\alpha$ -synuclein with lipid membrane using molecular dynamics", Materiały konferencyjne, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały – od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń, Poland, p.52

107. T. Rijavec, S. Bujok, S. Antropov, G. A. Newsome, J. Grau-Bove, I. Kralj Cigić, K. Kruczała, Ł. Bratasz, M. Strlič “Non-destructive analysis of DEHP surface concentrations and diffusion-evaporation in heritage PVC objects”, Book of Abstracts, MoDeSt 2024: 11<sup>th</sup> conference of the Modification, Degradation, Stabilization of Polymers Society, 01-04.09.2024 Palermo, Italy, p. 83-84
108. M. Ruggiero-Mikołajczyk, G. Mordarski, P. Michorczyk, B. Michorczyk, M. Zimowska “The role of modification of anode materials intended for use in SOFCs in the reaction of methane reforming”, Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 77, [ISBN 978-83-60514-37-5]
109. M. Ruggiero-Mikołajczyk, G. Mordarski, P. Michorczyk, B. Michorczyk, M. Zimowska “The role of modification of anode materials used in high temperature solid oxide fuel cells SOFCs, in the reaction of methane reforming”, Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 99, [ISBN 978-83-60514-38-2]
110. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, J. Dedeczek “Is the ability of distant metal ions to activate dioxygen specific only for zeolite materials?”, Book of Abstracts, XIX International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, ICTAC 2024, 02-06.09.2024 Sevilla, Spain, p. 43
111. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, V. Kainpachery, R. Tokarz-Sobieraj “DFT Studies on Single Atom and Sub-nanometer Copper Clusters Deposited on Titania for Hydrogen Evolution Reaction”, Book of Abstracts, 12<sup>th</sup> European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications (SPEA12), 17-21.06.2024 Belfast, United Kingdom, p. 315, [ISBN 978-1-85923-297-2]
112. D. Rutkowska-Żbik, U. Mazurska, G. Stochel, Ł. Orzeł “Predicting interactions between vitamin B12 derivatives and transport proteins by molecular docking”, Book of Abstracts, Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland, p. 92
113. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, P. Niemiec “DFT studies of CH<sub>4</sub> activation and coupling on metal heteropolyacid titania photocatalysts”, Book of Abstracts, International Symposium Catalytic Chemistry of C1 Molecules, C1Chem, 10-12.07.2024 Lille, France, p. 89
114. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, P. Niemiec, A.Y. Khodakov “DFT Studies on metal-heteropolyacid-titania systems for methane coupling and H<sub>2</sub> generation”, Book of Abstracts, Challenges on the Renewable Energy Storage, 01-04.09.2024 Liblice, Czech Republic, p. 7
115. M. Saad, M. Bucki, S. Bujok, D. Pawcenis, T. Rijavec, K. Górecki, Ł. Bratasz, I. Kralj Cigić, M. Strlič, K. Kruczała “Effect of accelerated thermal degradation of poly(vinyl chloride): the case of unplasticised PVC”, MoDeSt 2024: 11<sup>th</sup> conference of the Modification, Degradation, Stabilization of Polymers Society, 01-04.09.2024 Palermo, p. 327-328

116. M. Saad, S. Bujok, K. Kruczała "Machine Learning-assisted Raman Spectroscopy to Identify Plasticizers in PVC Heritage Objects", Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 24, [ISBN 978-83-60514-37-5]
117. B. Samojeden, D. Duraczyńska, M. Motak "Characterization and Catalytic Performance of Manganese, Iron, Copper, and Nickel-Promoted Cenospheres in Selective Reduction of NO by Ammonia (SCR-NH<sub>3</sub>)", Book of Abstracts, International Conference Energy Fuels Environment (EFE2024), 26-28.06.2024 Kraków, Poland, p. 151
118. 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, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 47, [ISBN 978-83-60514-37-5]
119. A. Senderowski, D. Rutkowska-Zbik, H. Remita "Platinum carbonyl Chini clusters for photocatalytic H<sub>2</sub> generation", 12<sup>th</sup> European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications (SPEA12), 21-06.2024 Belfast, Wlk. Brytania, pp. 80-81, [ISBN: 978-1-85923-297-2]
120. S. Shaju, A. Surendran, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, N. Spiridis, J. Korecki, E. Młyńczak "Magnetic properties of the epitaxial thin films of Fe<sub>x</sub>Sn<sub>y</sub>", Book of abstracts, 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 07-12.07.2024 Perugia, Italy, p.134
121. P. Sharma, D. Rutkowska-Zbik, P. Warszyński "Facile engineering of (C<sub>n</sub>N<sub>n+x</sub>), with unconventional plasmonic materials with single atom for sustainable H<sub>2</sub> production", Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IKiFP PAN, Kraków 2024, p. 79, [ISBN 978-83-60514-37-5]
122. K. Skowron, G. Mordarski, D. Kharytonau, E. Dryzek, M. Zimowska "Influence of Surface Nanocrystallization of Mg Substrate on Structure and Corrosion Resistance of Phosphate Conversion Coatings", Book of Abstracts, 7th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 102, [ISBN 978-83-60514-38-2]
123. W. Snoch, M. Stankiewicz, K. Szczepanowicz, I. Aleksic, M. Guzik "Designing a functional nanoemulsion using lactose esters and modified monomers of bacterial polyhydroxyalkanoates to improve the anticancer activity of SN-38", Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 68, [ISBN 978-83-60514-39-9]
124. S. Sowa, M. Zubik-Duda, A. Brzyska, D. Kamiński "Effect of 3-aryl substituent on fluorescent properties of benzo[b]phosphole oxides", Book of Abstracts, XXV International Symposium "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds", 21-22.11.2024 Łódź, Poland (T. Cierpień, J. Drabowicz, P. Kielbasiński, Eds.), Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu Humanistyczno-Przyrodniczego im. Jana Długosza w Częstochowie, P2-005

125. K. Stańkiewicz, J. Prajsnar, A. Lenart-Boroń „Analiza metataksonomiczna wody na etapach produkcji sztucznego śniegu w stacjach narciarskich”, VIII Ogólnopolskie Sympozjum Mikrobiologiczne „Metagenomy różnych środowisk”, 17-18.06.2024 Lublin (A. Banach, W. Goraj, A. Kuźniar, A. Szafranek-Nakonieczna, A. Wolińska, Eds.), Wydawnictwo KUL, p. 120, [ISBN 978-83-8288-165-3]
126. A. Sultan, M. Bilal Hanif, D. Kharytonau, K. Zheng “Effect of Ni, Co, and Cu–Doping in BCY Electrodes for Solid Oxide Fuel Cells: Microstructural and Electrical Properties”, Book of Abstracts, 7th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 107, [ISBN 978-83-60514-38-2]
127. S. Sułkowski, D. Rutkowska-Żbik, G. Stochel, Ł. Orzeł “Palladium(IV) complexes as potential precursors of cytostatics – synthesis and characterization”, Book of Abstracts, Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland, p. 110
128. M. Szaleniec, G. Oleksy, A. Sekuła, I. Aleksić, K. Krämer, A. Pierik, J. Heider “The Initiation Phase of the Catalytic Cycle in the Glycyl-Radical Enzyme Benzylsuccinate Synthase – Modelling and Experiment”, Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 116, [ISBN 978-83-60514-39-9]
129. K. Szczepanowicz, M. Szczęch, M. Procter, M. Leśkiewicz, M. Regulska, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, L. Szyk-Warszyńska, W. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński “Theranostic Nanocarriers to the Central Nervous System Therapies”, Book of Abstracts, 5<sup>th</sup> International Conference on Nanomaterials, Nanofabrication and Nanocharacterization (NANOMACH 2024), 18-24.04.2024 Oludeniz, Turkiye, p. 22
130. J. Szechyńska, T. Kruk, K. Szczepanowicz „Badania dotyczące kapsułek warstwowych w kontekście ich potencjalnego wykorzystania w leczeniu nowotworowej”, Abstract Book, XV International Scientific Conference “Horyzonty Nauki”, 07-08.06.2024 Kraków, Poland, p. 110
131. J. Szechyńska, K. Szczepanowicz “Layered precision: Crafting multilayer capsules for next-generation cancer therapy”, Book of Abstract, TURK-COSE 2024: VI. International Turkic World Congress on Science and Engineering, 19-21.12.2024 Baku, Azerbejdżan, (M. Barut, S. Namazov et al., Eds.), p. 352, [ISBN: 978-975-8062-56-0]
132. J. Szechyńska, K. Szczepanowicz „Opracowanie kapsułek warstwowych w kontekście ich zastosowania w terapii nowotworowej”, Materiały konferencyjne, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały - od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń, p. 43
133. J. Szechyńska, K. Szczepanowicz „Projektowanie wielowarstwowych kapsułek do wykorzystania w terapii przeciwnowotworowej”, Materiały konferencyjne, Nowe Trendy w Badaniach Naukowych - Wystąpienie Młodego Naukowca - Edycja IX, 9-10.10.2024 on line, (M. Kuczera, Ed.), CREATIVETIME, Kraków 2024, p. 33, [ISBN 978-83-66772-40-3]
134. K. Szczepanowicz, T. Kruk, P. Warszyński „Multiwarstwowe nanonośniki substancji aktywnych”, XI Konferencja Naukowa "Innowacje w praktyce", 06-07.06.2024 Lublin, p. 48, [ISBN 978-83-943796-9-8]

135. K. Szczepanowicz, M. Szczęch, T. Kruk, M. Prochner, P. Warszyński "Sequential adsorption of charged nanoobjects as a method of formation of drug delivery systems", NanoBio&Med2024 International Conference, 05-07.11.2024 Barcelona, Hiszpania, p. 100
136. B. Szermer-Olearnik, A. Wróblewska, P. Żeliszewska, A. Szczygieł, J. Mierzejewska, K. Węgierek-Ciura, D. Kozień, Z. Pędzich, K. Wątor, M. Chaszczyńska-Markowska, E. Pajtasz-Piasecka "Biofunctionalized boron carbide nanoparticles as targeted boron compounds in boron neutron capture therapy", Abstract Book, 20<sup>th</sup> International Congress on Neutron Capture Therapy (ICNCT 20), 24-28.06.2024 Kraków, Poland, p. 5
137. A. Szymaszek-Wawryca, P. Summa, U. Diaz, D. Duraczyńska, B. Samojeden, M. Motak "Natural and synthetic zeolites modified with Fe and Cu as catalysts for selective catalytic reduction of nitrogen oxides with ammonia", Program and Abstracts, 16<sup>th</sup> Pannonian International Symposium on Catalysis, 01-05.09.2024 Seggau, Austria (T. Ruh, Ed.), p. 102
138. D. Świąch, G. Palumbo, M. Oćwieja, A. Golda, J. Kozieł, C. Paluszkiwicz, N. Piergies "Nano-spectroscopic studies on the modified metallic surfaces for implantology application", Eu-NanoSpec European Meeting on InfraRed NanoSpectro-Imaging, 12-15.03.2024 Orsay, France, p. 21
139. M. Tataruch, A. Kluza, V. Illeová, T. Borowski, P. Cabadaj, M. Polakovič "S-1-(4-hydroxyphenyl)-ethanol dehydrogenase from *A. aromaticum*: catalytic stability studies", Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 55, [ISBN 978-83-60514-39-9]
140. M. Tataruch, P. Wójcik, A. Kluza, M. Polaković "Thermal inactivation of KSTD1 from *Rhodococcus erythropolis* – preliminary studies", Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 114, [ISBN 978-83-60514-39-9]
141. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik „Nanoklastery metaliczne Pd/Pt zakotwiczone na wolframowych anionach Keggina, jako katalizatory w reakcjach uwodornienia. Obliczenia DFT.”, Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IkiFP PAN, Kraków 2024, p. 85, [ISBN 978-83-60514-37-5]
142. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, P. Niemiec „Heteropolikwasy o strukturze Keggina na nośnikach tlenkowych. Obliczenia DFT.”, Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 453
143. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, P. Niemiec „Potencjał aplikacyjny nanoklastków metalicznych zakotwiczonych na anionie Keggina. Obliczenia DFT.”, Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań, p. 131

144. W. Tomal, K. Szczepanowicz "Manufacturing of three-dimensional, functional nanomaterials with controlled release of active substance for personalized medicine", Abstract book, 12<sup>th</sup> International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2024, 21-24.08.2024 Uzhhorod, Ukraine, International Science and Innovation cooperation, Technology transfer Department of Institute of Physics of NAS of Ukraine, 2024, p. 51, [ISBN: 978-617-8092-32-0]
145. Ł. Witkowski, A. Wiertel-Pochopień, D. Kosior, J. Zawła "A new method for measuring bubble velocity as a tool for water quality analysis", XII Ogólnopolska Konferencja Naukowa Inżynieria Chemiczna i Procesowa dla Środowiska i Medycyny, 11-14.09.2024 Sarbinowo, „Chemical and Process Engineering for Environment and Medicine. Current status in 2024”, p. 201, [ISBN 978-83-7789-746-1]
146. D. Świąch, P. Jabłoński, M. Gajewska, G. Palumba, M. Oćwieja, N. Piergies "Nanoscale Exploration: AFM-IR imaging of cysteine adsorption on gold nanoparticles", Book of abstracts, XVII<sup>th</sup> International Conference on Molecular Spectroscopy, 22-25.09.2024 Wojanów, Poland, (M. Drozd, A. Łukowiak, M. Ptak, Eds.), Low Temperature and Structure Research of the Polish Academy of Sciences, Wrocław 2024, p. 112, [ISBN: 978-83-940861-6-9]
147. A. Wojtkiewicz, G. Oleksy, M.A. Malinowska "Enzymatic Production of Bioactive Pentacyclic Triterpenes: A Case Study of Upcycling", Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 35, [ISBN 978-83-60514-39-9]
148. A. Wojtkiewicz, K. Zaręba "Bioinformatic analysis of 3-ketosteroid dehydrogenases family: in between the sequence & substrate specificity", Book of Abstracts, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 122, [ISBN 978-83-60514-39-9]
149. A. Wróblewska, B. Szermer-Olearnik, A. Szczygiał, J. Mierzejewska, K. Węgierek-Ciura, D. Koziń, Z. Pędzich, P. Żeliszewska, P. Migdał, R. Kruszakin, E. Pajtasz-Piasecka "Macrophages as potential boron carbide carriers in boron neutron capture therapy", Abstract Book, 20<sup>th</sup> International Congress on Neutron Capture Therapy (ICNCT 20), 24-28.06.2024 Kraków, Poland, p. 70
150. C. Xu, S.G. Calhoun, E.B. Mock, J. Zawła, G.G. Fuller "Antifoam hinders air release in lubrication oil", Abstract Book, 98<sup>th</sup> ACS Colloids and Surface Science Symposium, 23-26.06.2024 Washington, USA, p. 251
151. M. Zimowska, D. Kharytonau, K. Skowron, G. Mordarski "In situ formation of LDH-based nanocontainers on Zn alloy – a detailed investigation of their morphology and structure", Book of Abstracts, 11<sup>th</sup> Mid-European Clay Conference (MECC'24), 15-20.09.2024 Plzen, Czech Republic, (M. Štátný, M. Pospíšil, Eds.), Czech National Clay Group, p. 96, [ISSN: 1802-2480]

152. M. Zimowska, D. Kharytonau, K. Skowron, G. Mordarski, L. Szyk-Warszyńska, J. Krupa, J. Adamiec, S. Zimowski “Structure evolution, adhesion and mechanical properties of nanostructural layered double hydroxide coatings developed on Zn alloy”, Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 116, [ISBN 978-83-60514-38-2]
153. M. Zimowska, D.S. Kharytonau, K. Skowron, G. Mordarski, S. Zimowski “Factors influencing the growth of layered double hydroxide layers on Zn alloy for smart corrosion protection”, Program & Abstracts, 61<sup>st</sup> Annual Meeting Of The Clay Minerals Society and 5<sup>th</sup> Asian Clay Conference, 03-07.06.2024 Manoa, USA, p. A 148
154. M. Zimowska, M. Śliwa, H. Pálková, R. P. Socha, P. Niemiec “Efficiency and factors affecting basic properties of smectite-derived porous composites”, Book of Abstracts, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IkiFP PAN, Kraków 2024, p. 31, [ISBN 978-83-60514-37-5]
155. M. Zimowska, M. Śliwa, R.P. Socha “Nanostructured mineral-based hybrid composites for energy-related applications”, Book of Abstracts, 11<sup>th</sup> Mid-European Clay Conference (MECC’24), 15-20.09.2024 Plzen, Czech Republic, (M. Št’astný, M. Pospíšil, Eds.), Czech National Clay Group, p. 35, [ISSN: 1802-2480]
156. M. Zimowska, M. Śliwa, H. Pálková, J. Gurgul, R. P. Socha, P. Niemiec, E. Scholtzova “Efficiency and factors affecting base properties of smectite-derived porous composites”, Program & Abstracts, 61<sup>st</sup> Annual Meeting of The Clay Minerals Society and 5<sup>th</sup> Asian Clay Conference, 03-07.06.2024 Manoa, USA, p. A 198
157. M. Zimowska, M. Śliwa, H. Pálková, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Gurgul, K. Łątka, R.P. Socha “Ex situ spectroscopic studies of microwave-processed mineral nanohybrid composites for energy-related applications”, Book of Abstracts, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 114, [ISBN 978-83-60514-38-2]
158. S. Zimowski, M. Zimowska, D.S. Kharytonau, K. Skowron “Adhesion and micromechanical properties of nanostructural layered double hydroxide coatings developed on Zn alloy for smart corrosion protection”, Program & Abstracts, 61<sup>st</sup> Annual Meeting of The Clay Minerals Society and 5<sup>th</sup> Asian Clay Conference, 03-07.06.2024 Manoa, USA, p. A 129

## **KSIĄŻKI WYDANE NAKŁADEM INSTYTUTU [z numerem ISBN]**

1. LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne ,LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024, Kraków (A. Drzewiecka-Matuszek, Ed.), IkiFP PAN, Kraków 2024, p. 1-113, [ISBN 978-83-60514-37-5]
2. 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland (J. Andrys-Olek, T. Borowski, A. Kluza, K. Seweryn-Ożóg, M. Szaleniec, A. Wojtkiewicz, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 1-131, [ISBN 978-83-60514-39-9]
3. 7th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland (G. Mordarski, K. Skowron, Eds.), ICSC PAS, Kraków 2024, p. 1-124, [ISBN 978-83-60514-38-2]

## **FUNKCJE EDYTORSKIE**

### **POWOŁANIE NA CZŁONKA KOMITETU REDAKCYJNEGO**

- Ł. Bratasz - Editorial Board, NJP Heritage Science, ISSN 3059-3220

### **EDYTORSTWO MONOGRAFII**

1. Special Issue "Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS-2024)", *Electrochimica Acta* (G.D. Sulka, P. Warszyński, L. Zaraska, M. Zimowska, *Guest Eds.*), Wydawca Elsevier, ISSN 0013-4686
2. Special Issue "Polyelectrolytes and Polyelectrolyte Complexes: Ionic Macromolecule-Based Functional Materials", *International Journal of Molecular Sciences* (B. Jachimska *Guest Ed.*), Wydawca MDPI, ISSN 1422-0067
3. Special Issue "Zeolites and Mesoporous Materials: Properties and Applications, 2nd Edition", *Molecules* (Ł. Kutarasiński *Guest Ed.*), Wydawca MDPI, ISSN 1420-3049
4. Special Issue "Biomaterials Based on Calcium Phosphates and Their Modifications", *Molecules* (A. Zima, E. Cichoń, J. Czechowska *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 1420-3049
5. Special Issue "Mechanisms of Formation of Biomolecule Complexes: Theory, Experiment, Applications", *Biomolecules* (A. Pomorska, A. Michna, M. Morga *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 2218-273X
6. Special Issue "Mechanisms and Kinetics of Interactions of Biomolecules at Interfaces: 2nd Edition", *Biomolecules* (M. Wasilewska, A. Michna, M. Morga *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 2218-273X
7. Special Issue "Innovative Biomaterials for Precise Drug Delivery", *Pharmaceutics* (A. Drabczyk, S. Kudłacik-Kramarczyk *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 1999-4923
8. Special Issue "Advances of Bio-Based Materials in Surface Chemistry", *Materials* (M. Krzan *Guest Ed.*), Wydawca MDPI, ISSN 1996-1944

9. Special Issue “Smart Polymeric Materials: New Developments and Perspectives for Future Applications”, *Applied Surface Science Advances* (A. Bratek-Skicki, K. Szczepanowicz *Guest Eds.*), Wydawca Elsevier, ISSN 2666-5239
10. Special Issue “Functional Biomaterials in Biomedical Applications”, *Pharmaceutics* (A. Drabczyk, S. Kudłacik-Kramarczyk, *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 1999-4923
11. Special Issue “Gel-Based Novel Wound Dressing”, *Gels* (A. Drabczyk, S. Kudłacik-Kramarczyk, *Guest Eds.*), Wydawca MDPI, ISSN 2310-2861

## **OCHRONA WŁASNOŚCI INTELEKTUALNEJ**

### **UZYSKANE PATENTY**

1. M. Mizerska-Kowalska, S. Sowia, 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”, Polish Patent, Pat.244979 (16.01.2024, 08.04.2024 w W.U.P.)
2. M. Guzik, M. Mosiałek, P. Pasierb, M. Mączka „Ogniwo glinowo - jonowe do magazynowania energii elektrycznej”, Polish Patent, Pat.245661 (16.05.2024, 16.09.2024 w W.U.P.)

### **ZGŁOSZENIA PATENTOWE**

- 1 M. Guzik, W. Snoch, K. Szczepanowicz, M. Szczęch, M. Mikula, M. Statkiewicz, M. Cybulska-Lubak „Kompozycja w postaci nanoemulsji i jej zastosowanie w leczeniu nowotworów, zwłaszcza raka jelita grubego”, Zgłoszenie patentowe RP, P.447923 (2024)
- 2 S. Przemieniecki, M. Niemiec, S. Bednarz, M. Guzik, A. Gorczyca, J. Szerement „Sposób wytwarzania stymulatorów wzrostu roślin rolniczych oraz kompozycja je zawierająca i zastosowanie tych stymulatorów do poprawy wzrostu roślin rolniczych we wczesnym etapie ich rozwoju”, Zgłoszenie patentowe RP, P.447925 (2024)
- 3 M. Guzik, S. Bednarz, H. Skrzyniarz „Sposób wytwarzania pożywki do hodowli sinic”, Zgłoszenie patentowe RP, P.447926 (2024)

## UDZIAŁ W KONFERENCJACH I ZEBRANIACH NAUKOWYCH 2024

### WYKŁADY PLENARNE, KEY-NOTE I NA ZAPROSZENIE

- 1 G. Antczak, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, B. Gołyszny, N. Spiridis "Identification of chirality of the organic molecular domains in the reciprocal space", 37th European Conference on Surface Science (ECOSS-37), 17-21.06.2024 Harrogate, United Kingdom, p. 30
- 2 T. Borowski, J. Andrys-Olek "Computational studies on ectoine synthase – parametrization, MD simulations and QM/MM", CTTC IX, 01-05.09.2024 Kraków, Poland
- 3 Ł. Bratasz "When Chemistry Meets Other Disciplines in Heritage Science", 7th International Congress Chemistry for Cultural Heritage 2024 (CHEMCH 2024), 02-05.07.2024 Bratislava, Slovakia
- 4 Ł. Bratasz "Cultural Heritage Research as an Innovation and Mitigation Driver", Resilient cultural heritage in times of climate crisis, 16-17.04.2024 Berlin, Germany
- 5 Ł. Bratasz "Sustainability-conscious management of art collections", Meet, See, Do 2024 – International Museum Conference that Makes the Difference, 18-19.04.2024 Tivat, Montenegro
- 6 Ł. Bratasz, S. Bujok, K. Poznańska, S. Antropov, Ł. Berger, M. Bury, M. Strojceki, N. Avgerou, R. Kozłowski, M. Łukomski, M. Soboń, A. Bridarolli, A. Janas, L. Fuster Lopez, C. Krarup Andersen, M. Sharff, L. Krzemień "What do we know about objects", Mechanical Insights: Shaping the Future of Museum Collection Preservation, 15-19.11.2024 Los Angeles, USA
- 7 G. Gochev, E.V. Aksenenko, V.I. Kovalchuk, L. Szyk-Warszyńska, D. Gawęł, J. Zawąła, P. Warszyński, E. Schneck, R. Miller, V.B. Fainerman "Current view on the adsorption dynamics of bovine serum albumin at water/air interface", 19th Food Colloids Conference, 14-18.04.2024 Thessaloniki, Greece
- 8 K. Haraźna, S. Bujok, M. Guzik, T. Nitkiewicz, K. Grzela, K. Stępień-Hołubczat, H. Beneš, J. Hodan, M. Nevoralová, G. Santos Medeiros, M. Wojnarowska, A. Sobczak-Kupiec "Kompozytowe folie sporządzone z bakteryjnego polimeru oraz cząstek nieorganicznych wykazujące polepszone właściwości użytkowe jako rozwiązanie kryzysu opakowaniowego związanego z wprowadzaniem dyrektywy PPWR.", 13 Międzynarodowe Targi Kompozyt EXPO 2024, 16-17.10.2024 Kraków, Polska
- 9 R. Karcz „Biodegradowalne plastiki pochodzenia bakteryjnego”, 2gi Kongres Nauka dla Społeczeństwa, 09.06.2024 Warszawa
- 10 M. Matczak, B. Anastaziak, M. Kowacz, M. Urbaniak, D. Kiphart, F. Stobiecki, A. Mandziak, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Kuświk "Tailoring magnetic properties of Co/Ni bilayers by plasma oxidation", 2D Quantum Materials for Spintronics, 2DQMS, 29-31.01.2024 Poznań, Poland
- 11 M. Szaleniec, M. Głanowski, Patrycja Wójcik, Gabriela Oleksy, Magdalena Prochner, Johann Heider „Enzyme Kinetics Meeting Modeling - Understanding Mechanisms and Predicting Enzyme Activity”, STRENDA/ESAB Symposium - The Need for Reproducibility of Enzyme Reaction Data, 14.11.2024 Politechnika Łódzka, Łódź, Poland

- 12 B. Szermer-Olearnik, A. Wróblewska, P. Żeliszewska, A. Szczygieł, J. Mierzejewska, K. Węgierek-Ciura, D. Kozień, Z. Pędzich, K. Wątor, M. Chaszczyńska-Markowska, E. Pajtasz-Piasecka „Biofunctionalized boron carbide nanoparticles as targeted boron compounds in boron neutron capture therapy”, 20th International Congress on Neutron Capture Therapy (ICNCT 20), 24-28.06.2024 Kraków, Poland
- 13 R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, P. Niemiec „Heteropolikwasy o strukturze Keggina na nośnikach tlenkowych. Obliczenia DFT.”, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
- 14 R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik, P. Niemiec „Potencjał aplikacyjny nanoklasterów metalicznych zakotwiczonych na anionie Keggina. Obliczenia DFT.”, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
- 15 W. Płaziński “Multiscale computational approaches to investigate the conformation of biomolecules”, II Interdyscyplinarne Seminarium Naukowe „Bioaktywni z Natury”, 20-22.12.2024 Kazimierz Dolny

## REFERATY I KOMUNIKATY

1. G. Antczak, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, B. Gołyszny, N. Spiridis "Identification of chirality of the organic molecular", 10th International Workshop on Surface Physics, 22-26.09.2024 Niemcza, Poland,
2. Ł. Berger, S. Bujok, M. Strojcki, M. Soboń, S. Antropov, R. Kozłowski, E. Hagan, D. Thickett, Ł. Bratasz "HERIe – digital preventive conservation platform", 6th International Conference on Innovation in Art Research and Technology – InART2024, 04-07.06.2024 Oslo, Norway
3. Ł. Bratasz, Ł. Berger "HERIe preventive conservation digital platform – fire risk module", IIC Lima Congress 2024: Sustainable Solutions for Conservation: new strategies for new times, 23-27.09.2024 Lima, Peru
4. Ł. Bratasz, S. Bujok, S. Antropov, M. Bury, Ł. Berger, K. Poznańska "What do we know about objects vulnerability to environmental variations?" Preventive conservation of paintings in heritage institutions, 09.04.2024 Akademia Sztuk Pięknych im. J. Matejki w Krakowie
5. Ł. Bratasz, M. Strojcki, M. Bury, S. Bujok, Ł. Berger "HERIe – a digital preventive conservation platform", Preventive conservation of paintings in heritage institutions, 09.04.2024 Akademia Sztuk Pięknych im. J. Matejki w Krakowie
6. S. Bujok, A. Bridarolli, M. Łukomski, Ł. Bratasz "Reconsidering Museums' Climate and Seasonal Adjustment for Vulnerable Artifacts", IIC Lima Congress 2024: Sustainable Solutions for Conservation: new strategies for new times, 23-27.09.2024 Lima, Peru
7. M. Bury, S. Antropov, A. Janas, Ł. Bratasz „Rozwój spękań w obrazach na płótnie”, Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków, AChwOZ’XXIV, 28-29.11.2024 Warszawa
8. K. A. Chałupka-Śpiewak, R. Sadek, W. Maniukiewicz, P. Mierczyński, M. I. Szykowska-Jóźwik, J. Rynkowski, J. Gurgul, S. Dźwigaj „Fischer-Tropsch synthesis – old way to the alternative fuel production with the new heterogeneous catalysts”, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków

9. A. Drzewiecka-Matuszek, J. Dedecek, D. Rutkowska-Zbik "Exploring metal cooperativity in O<sub>2</sub> activation by binuclear transition metal sites", Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland
10. A. Drzewiecka-Matuszek, K. Samson, M. Smoliło-Utrata, A. Kornas, R. Kosydar, M. Śliwa, E. Tabor, K. Mlekodaj, S. Sklenak, J. Dedecek, D. Rutkowska-Zbik „Współ w zespół, by moc móc wzmóc, czyli współdziałanie centrów metalicznych”, 66. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
11. D. S. Kharytonau, M. A. Osipenko, J. Ryl, J. Adamiec, K. Skowron, I. I. Kurilo, N. Almqvist "Effect of permanganate ions on corrosion inhibition of Mg-Al-Zn alloys containing different amounts of Li", 7th International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
12. M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk „Physical mixing as a simple and effective method of introducing ibuprofen into mesopores”, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków, Poland
13. M. Gackowski, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska "Diffusion of ibuprofen molecules into mesopores of SBA-15 material", XXIV Zeolite Forum, 04-08.06.2024 Będlewo
14. B. Gołyszny, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, G. Antczak „LEEM and PEEM investigation of structural and electronic properties of F16CuPc thin films on Ag (100) surfaces”, 37<sup>th</sup> European Conference on Surface Science (ECOSS-37), 17-21.06.2024 Harrogate, United Kingdom
15. B. Gołyszny, T. Wagner, D. Wilgocka-Ślęzak, N. Spiridis, G. Antczak “LEEM and PEEM investigation of ultrathin F16CuPc films on Ag (100) surfaces", 10<sup>th</sup> International Workshop on Surface Physics, 22-26.09.2024 Niemcza, Poland
16. E. Gumieniczek-Chłopek, J. Odrobińska-Baliś, G. Opiła, S. Zapotoczny, C. Kapusta „Magnetically Controlled Smart Delivery Systems based on Polysaccharides Capsules”, Madeira International Conference on Emerging Trends and Future of Nanomaterials for Human Health (Mad-Nano24), 28-30.11.2024 Funchal, Madeira Island, Portugal
17. M. Guzik, K. Harażna, J. Prajsnar, W. Snoch “Polyhydroxyalkanoates – sustainable biopolymers for innovative chemical and material synthesis”, Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland
18. M. Guzik, A. Bojarski, R. Bugno, J. Staroń, K. Stępień-Hołubczat, J. Kryściak-Czerwenka, J. Prajsnar “Development of Chemical and Enzymatic Pathways for Modifying the Amino Group of 6-Aminopenicillanic Acid by Introducing Bacterial-Derived 3-Hydroxyacids into the Molecule”, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
19. B. Jachimska, A. Kamińska „Effect of the Surface Charge Density on Changes in  $\alpha$ -Synuclein Structure”, American Chemical Society National Meeting Spring 2024, 17-21.03.2024 New Orleans, Louisiana & Hybrid

20. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, M. Krzan „Badanie wpływu powierzchniowych wiązań wodorowych na aktywność i dylatacyjną elastyczność powierzchniową mieszanin saponiny”, Ogólnopolska Konferencja Interdyscyplinarna "ALFA I OMEGA CZ. XIV", 14-15.03.2024 Kraków
21. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, M. Krzan „Analiza wpływu powierzchniowych wiązań wodorowych na aktywność i dylatacyjną elastyczność powierzchniową mieszanin saponiny”, XVI Interdyscyplinarna Konferencja Naukowa TYGIEL 2024 „Interdyscyplinarność kluczem do rozwoju”, 21-24.03.2024 Lublin
22. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, M. Krzan „Modern saponin-based biosurfactants as an alternative to the currently used detergents”, National Scientific Conference „e-Factory of Science” XI edition, 06.04.2024 Łódź
23. M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Krzan “Exploring the Influence of Interfacial Hydrogen Bonding on Surface Properties and Foam Stability in Saponin Mixtures”, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
24. K. Kamińska, B. Grygier, E. Trojan, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, W. Lasoń, A. Basta-Kaim “Influence of cyclosporin A, free and loaded in theranostic nanocarriers on the oxygen-glucose deprivation-induced cell damage in organotypic hippocampal cultures”, 37<sup>th</sup> ECNP Congress 2024, 21-24-09.2024 Milan, Italy
25. A. Kamińska, Ł. Luśtyk, J. Gurgul, B. Jachimska “Comparison conformational stability of lysozyme adsorbed on the gold surface and artificial lipid membrane”, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
26. K. Kieca, M. Oszejka, D. Rutkowska-Żbik, G. Stochel „Badania mechanizmu S-nitrozacji z udziałem modelowych żelazo(III)-porfiryń”, 66. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
27. W. Kieres, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Krzan „Interakcje saponiny ze związkami chemicznymi pełniącymi funkcję donorów lub akceptorów wiązań wodorowych na granicy faz woda-powietrze oraz ich wpływ na stabilność emulsji”, Ogólnopolska Konferencja Interdyscyplinarna "ALFA I OMEGA CZ. XVI", 19-20.09.2024 Kraków
28. W. Kieres, S. Kudłacik-Kramarczyk, M. Krzan „Jak saponiny stabilizują emulsje: rola wiązań wodorowych”, XIX Ogólnokrajowa Konferencja Młodzi Naukowcy w Polsce - Badania i rozwój, 24.05.2024, Łódź
29. J. Klęba, D. Duraczyńska, K. Zheng, M. Fedyna, J. Mokrzycki “The effect of copper(II) salt precursors on HKUST-1 physicochemical properties and removal of trivalent chromium ions from aqueous solutions”, International Conference Energy Fuels Environment (EFE2024), 26-28.06.2024 Kraków, Poland
30. R. Kosydar, E. Lalik, D. Duraczyńska, J. Gurgul, T. Szumelda, A. Drelinkiewicz “The activity of bimetallic PdIr/C and monometallic Ir/C catalysts for the conversion of furfural via its hydrogenation and acetalization”, Challenges on the Renewable Energy Storage, 01-04.09.2024 Liblice, Czech Republic

31. K. Kruczała, M. Saad, M. Bucki, S. Bujok, D. Pawcenis, T. Rijavec, K. Górecki, Ł. Bratasz, I. Kralj Cigić, M. Strlič "Towards the understanding of the thermal degradation behavior of the rigid and plasticized poly(vinyl chloride)", MoDeSt 2024: 11<sup>th</sup> conference of the Modification, Degradation, Stabilization of Polymers Society, 01-04.09.2024 Palermo, Italy
32. T. Kruk, O. Hotsanoha, K. Szczepanowicz „Modyfikacja i osadzanie tlenku grafenu (GO) oraz hybryd GO z polielektrolitami/nanocząstkami metalicznymi na powierzchni złota jako platforma zwiększająca czułość oraz stabilność dla nowego typu immunosensorów”, 66. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
33. T. Kruk, R. Meenambal, K. Jakubowska, J. Gurgul, K. Szczepanowicz, M. Szczęch, L. Szyk-Warszyńska, N. Łopuszyńska, K. Stachurski, W. P. Węglarz, D. Jantas, P. Warszyński „Wpływ domieszkowania lantanowcami na właściwości fizykochemiczne i potencjał neuroprotektoryjny nanocząstek tlenku ceru funkcjonalizowanych kwasem poliakrylowym”, 66. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
34. M. Krzan, M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, P. Warszyński, B. Braunschweig "Analysis of foam stability with saponin: Interfacial hydrogen bonding", 38<sup>th</sup> Conference European Colloid and Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copenhagen, Denmark
35. M. Krzan, M. Jamroży, S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, P. Warszyński "The effect of interfacial hydrogen bonding on the surface properties and foam stability in saponin mixtures", 15<sup>th</sup> European Foam Conference (EUFOAM), 30.06-04.07.2024 Dresden, Germany
36. K.J. Legawiec, M. Kruszelnicki, P. Basařová, M. Basařová, J. Zawała, I. Polowczyk "Sustainable flotation solutions: Investigating the impact of biological origin surfactants on bubble-particle interactions", Sustainable flotation solutions: Investigating the impact of biological origin surfactants on bubble-particle interactions, 17-18.06.2024 Dresden, Germany
37. A. Lenart-Boroń, K. Stankiewicz, J. Prajsnar, A. Ratajewicz, N. Czernecka "Critical points of degradation of selected micropollutants in the context of circular economy solutions in Polish Mountain areas", Ogólnopolska konferencja naukowo-techniczna: Woda - kluczowy czynnik rozwoju cywilizacji, 18-20.09.2024 Kraków
38. A.M. Leshansky, B. Y. Rubinstein, I. Fouxon, M. Sadowska, D. Johannsmann, Z. Adamczyk "Quartz crystal microbalance (QCM) frequency response to discrete adsorbates in liquids", 26<sup>th</sup> International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2024), 25-30.08.2024 Daegu, Korea
39. E. Madej, K. Freindl, J. Korecki, N. Kwiatek, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis "Switching of Néel vector in hematite thin films by exchange coupling with cobalt layers", 13<sup>th</sup> conference on Low-Energy and Photoemission Electron Microscopies LEEM-PEEM13, 19-23.08.2024 Montréal, Canada
40. E. Madej, K. Freindl, J. Korecki, N. Kwiatek, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis "Switching of Néel vector in hematite thin films by exchange coupling with cobalt layers" 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 07-12.07.2024 Perugia, Italy

41. E. Madej, K. Freindl, J. Korecki, N. Kwiatek, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, M. Zając, N. Spiridis "How PEEM helps in the study of antiferromagnets?", Joint Meeting of Polish Synchrotron Radiation Society and Solaris Centre Users, 11-13.09.2024 Krakow, Poland
42. M. Matczak, B. Anastaziak, M. Kowacz, M. Urbaniak, D. Kiphart, F. Stobiecki, A. Mandziak, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzak, P. Kuświk, "Tailoring magnetic properties of Co/Ni bilayers by plasma oxidation" 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 7-12.07.2024 Perugia, Italy
43. R. Meenambal, T. Kruk, K. Jakubowska, J. Gurgul, K. Szczepanowicz, M. Szczęch, L. Szyk-Warszyńska, D. Jantas, N. Łopuszańska, P. Warszyński "Effect of Lanthanide Doping on Physiochemical and Neuroprotective Properties of CeO<sub>2</sub> Nanoparticles", 38<sup>th</sup> Conference of the European Colloid & Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copenhagen, Denmark
44. A. Michna, P. Batys, M. Dąbkowska, B. Kowalski, A. Pomorska, M. Wasilewska, Z. Adamczyk "Fibroblast Growth Factor 21 Adsorption on Polyelectrolyte Layers: Modelling and Experimental Studies", Polymers 2024, Composites 2024 and 3BS Materials 2024 International Joint Conference, 06-08.03.2024 Seville, Spain
45. E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, A. Surendran, S. Shaju, N. Spiridis, "Structural and electronic properties of ultrathin Sn deposited on Pt(111) studied by low energy electron microscopy", 37<sup>th</sup> European Conference on Surface Science (ECOSS-37), 17-21.06.2024 Harrogate, United Kingdom
46. E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, A. Surendran, S. Shaju, G. Bihlmayer, N. Spiridis "Ultrathin Sn deposited on Pt(111): growth and electronic structure", Joint Meeting of Polish Synchrotron Radiation Society and Solaris Centre Users, 11-13.09.2024 Krakow, Poland
47. E. Mlynczak, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, A. Surendran, S. Shaju, N. Spiridis "Structural and electronic properties of ultrathin Sn deposited on Pt(111) studied by low energy electron microscopy", 13<sup>th</sup> conference on Low-Energy and Photoemission Electron Microscopies LEEM-PEEM13, 19-23.08.2024 Montréal, Canada
48. M. Morga, P. Batys, D. Kosior, A. Harmat, T. Kastinen, P. Bonarek, D. Lupa, Z. Adamczyk, J.L. Lutkenhaus, M. Sammalkorpi "Influence of external factors on the structure of poly-L-lysine (PLL) and poly-L-glutamic acid (PGA) and formation of PLL/PGA complexes", Polymers 2024 International Joint Conference, 06-08.03.2024 Sevilla, Spain
49. M. Oćwieja, A. Barbasz, P. Smoleń, M. Wasilewska, D. Duraczyńska, B.D. Napruszewska, A. Węgrzynowicz „Aktywność biologiczna nanocząstek srebra modulowana ich ładunkiem powierzchniowym”, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały - od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń
50. J. Odrobińska-Baliś, M. Prochner, K. Krużel, M. Regulska, M. Leśkiewicz, S. Zapotoczny, W. Lasoń, W. Węglarz, K. Szczepanowicz "Chitosan-based nanocapsules as a multifunctional drug delivery system", 66. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
51. G. Oleksy, M. Szaleniec, I. Aleksić, K. Krämer, J. Heider "Unraveling the catalytic properties of benzylsuccinate synthase from a novel toluene-degrading strain *Aromatoleum sp.*", 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland

52. A. Pacuła, J. Gurgul, P. Pietrzyk, J. Dobrzyńska, M. Ruggiero-Mikołajczyk, D. Duraczyńska "Electrocatalysts, adsorbents for arsenic removal and components for polymer composite membranes based on pyrolytic carbon deposited on metals/metal oxides derived from hydrotalcite-like materials", The 11<sup>th</sup> Torunian Carbon Symposium Copernican revolution in carbon science (TCS 2024), 15-18.09.2024 Toruń
53. A. Pajor-Świerzy, K. Kozak, D. Duraczyńska, A. Wiertel-Pochopień, J. Zawala, K. Szczepanowicz "Effect of silver shell thickness on conductivity of coatings based on nickel-silver core-shell nanoparticles", NanoTech Poland 2024 14<sup>th</sup> International Conference, 05-07.06.2024 Poznań, Poland
54. A. Pajor-Świerzy, K. Kozak, L. Szyk-Warszyńska, D. Duraczyńska, K. Szczepanowicz "Fabrication of Conductive Coatings Based on Nickel@Silver Core@Shell Nanoparticles by Low-Temperature Sintering Methods", 5<sup>th</sup> International Conference on Nanomaterials, Nanofabrication and Nanocharacterization, 18-24.04.2024 Oludeniz, Türkiye
55. A. Pajor-Świerzy, L. Szyk-Warszyńska, D. Duraczyńska, K. Szczepanowicz "UV-Vis sintering process of coatings based on nickel-silver core-shell nanoparticles for fabrication of printed flexible electronics", 24<sup>th</sup> IEEE International Conference on Nanotechnology, 8-11.07.2024 Gijón, Spain
56. T. Pańczyk „Degradacja politereftalanu etylenu (PET) badana przy użyciu reaktywnej dynamiki molekularnej”, XI Konferencja Naukowa "Innowacje w praktyce", 06-07.06.2024 Lublin
57. T. Pańczyk "Modeling Plastic Degradation Using Shock Compression and Reactive Molecular Dynamics", IX Polymer Science and Technology Congress with International Participation, PolymerTR, 16-19.09.2024 Ankara, Türkiye
58. T. Pańczyk, K. Nieszorek, P. Wolski "Surface Chemistry of Degraded Polyethylene Terephthalate (PET): Insights from Reactive Molecular Dynamics Study", Polymer Degradation Discussion Group, 35<sup>th</sup> PDDG, 23-26.06.2024 Limassol, Cypr
59. Z. Pędzich, D. Kozień, A. Wojteczko, B. Szermer-Olearnik, P. Żeliszewska, Z. Adamczyk, A. Wróblewska, A. Szczygieł, K. Węgierek-Ciura, K. Krygowska, J. Mierzejewska, E. Pajtasz-Piasecka „Various methods of synthesis and determination of the potential for use of boron carbide in BNCT therapy”, 20<sup>th</sup> International Congress on Neutron Capture Therapy (ICNCT 20), 24-28.06.2024 Kraków, Poland
60. N. Piergies, M. Oćwieja, K. Cieżak, D. Świąch, M. Roman, W. M. Kwiatek, K. Pogoda "Design and functionalization of the metal nanoparticles for future biomedical approaches : micro- and nano-spectroscopy studies", 28<sup>th</sup> International Conference of Raman Spectroscopy (ICORS), 28.07-02.08.2024 Rome, Italy
61. N. Piergies, M. Oćwieja, K. Pogoda, K. Cieżak, M. Roman, W.M. Kwiatek "Effectivnes of the metal nanoparticles as drug carriers in in vitro model of non-small cell lung cancer. Infrared micro- and nano-spectroscopy approaches", Eu-NanoSpec European Meeting on InfraRed NanoSpectro-Imaging, 12-15.03.2024 Orsay, France
62. W. Płaziński, P. Wolski, V. Lutsyk „Computational approaches to study the conformation of saccharides. From quantum mechanics to coarse-graining.", 26<sup>th</sup> IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry, 18-22.08.2024 Beijing, China

63. K. Poznańska, S. Bujok, Ł. Bratasz "Dynamic mechanical properties of heritage materials", 7<sup>th</sup> International Congress on Chemistry for Cultural Heritage, 02-05.07.2024 Bratislava, Slovakia
64. M. Procner, M. Szczęch, M. Regulska, M. Leśkiewicz, W. Lasoń, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Polymeric-based nanocarriers for delivery of neuroprotective drugs through blood-brain barrier", Materiały zjazdowe streszczenia, 66. Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
65. M. Procner, M. Szczęch, M. Regulska, M. Leśkiewicz, W. Lasoń, P. Warszyński, K. Szczepanowicz "Multilayer nanocarriers - a promising tool for delivery of neuroprotective drugs through blood-brain barrier", NanoBio&Med2024 International Conference, 05-07.11.2024 Barcelona, Spain
66. A. Przybyłowicz, S. Kudłacik-Kramarczyk, W. Kieres, A. Drabczyk, M. Krzan „Oleożele na bazie oleju lnianego jako potencjalne nośniki leków hydrofobowych - badania fizykochemiczne i zastosowanie”, Ogólnopolska Konferencja Interdyscyplinarna pn: „COGITO CZ. XIV”, 01-02.08.2024 Kraków
67. A. Przybyłowicz, S. Kudłacik-Kramarczyk, W. Kieres, A. Drabczyk, M. Krzan „Wosk pszczeli w farmacji naturalnej - jego rola w oleożelach terapeutycznych”, Ogólnopolska Konferencja Interdyscyplinarna "ALFA I OMEGA CZ. XVI", 19-20.09.2024 Kraków
68. M. Rak, T. Kruk, D. Janstas, K. Szczepanowicz „Polielektrolitowe nanonośniki substancji aktywnych”, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały - od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń
69. K. Rakowski, B. Jachimska "Monitoring the interaction of  $\alpha$ -synuclein with lipid membrane using molecular dynamics", VII Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały – od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń, Poland
70. T. Rijavec, S. Bujok, S. Antropov, G. A. Newsome, J. Grau-Bove, I. Kralj Cigić, K. Kruczała, Ł. Bratasz, M. Strlič "Non-destructive analysis of DEHP surface concentrations and diffusion-evaporation in heritage PVC objects", MoDeSt 2024: 11<sup>th</sup> conference of the Modification, Degradation, Stabilization of Polymers Society, 01-04.09.2024 Palermo, Italy
71. D. Rutkowska-Żbik "Pt Chini clusters for H<sub>2</sub> generation", COST 18234 meeting „Catalysts for water splitting and energy storage”, 03-05.04.2024 Wiedeń, Austria
72. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, J. Dedeczek "Is the ability of distant metal ions to activate dioxygen specific only for zeolite materials?", XIX International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis, ICTAC 2024, 02-06.09.2024 Sevilla, Spain
73. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, P. Niemiec "DFT studies of CH<sub>4</sub> activation and coupling on metal heteropolyacid titania photocatalysts", International Symposium Catalytic Chemistry of C1 Molecules, C1Chem, 10-12.07.2024 Lille, France
74. D. Rutkowska-Żbik, R. Tokarz-Sobieraj, V. Kaipanchery, P. Niemiec, A.Y. Khodakov "DFT Studies on metal-heteropolyacid-titania systems for methane coupling and H<sub>2</sub> generation", Challenges on the Renewable Energy Storage, 01-04.09.2024 Liblice, Czech Republic

75. M. Saad, S. Bujok, K. Kruczała "Machine Learning-assisted Raman Spectroscopy to Identify Plasticizers in PVC Heritage Objects", LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
76. A. Senderowski, D. Rutkowska-Zbik, A. Mendez, I. Lampre, H. Remita "TD-DFT studies on photochemical properties of the platinum carbonyl Chini clusters", LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024, Kraków
77. A. Senderowski, D. Rutkowska-Zbik, H. Remita "Platinum carbonyl Chini clusters for photocatalytic H<sub>2</sub> generation", 12<sup>th</sup> European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications (SPEA12), 21-06.2024 Belfast, Wlk. Brytania
78. K. Stankiewicz, A. Lenart-Boroń, J. Prajsnar „Ocena czystości mikrobiologicznej oraz występowania antybiotyków i genów lekooporności w śniegu technicznym w stacjach narciarskich na Podhalu”, Ogólnopolska konferencja naukowo-techniczna: Woda - kluczowy czynnik rozwoju cywilizacji, 18-20.09.2024 Kraków
79. M. Szaleniec "Multipurpose enzymatic system for synthesis of drug candidates", Life Science Open Space 2024, 28-29.11.2024 Auditorium Maximum, Kraków
80. M. Szaleniec, G. Oleksy, I. Aleksić, K. Krämer, J. Heider "QM:MM modeling and microkinetic analysis explains enantioselectivity, kinetic isotope effect and H/D exchange in reaction catalyzed by benzylsuccinate synthase", E-Congress European Society of Applied Biocatalysis 2nd Edition, 25-27.11.2024 online
81. J. Szechyńska, K. Szczepanowicz „Layered precision: Crafting multilayer capsules for next-generation cancer therapy”, TURK-COSE 2024: VI. International Turkic World Congress on Science and Engineering, 19-21.12.2024 Baku, Azerbejdżan
82. J. Szechyńska, K. Szczepanowicz „Opracowanie kapsulek warstwowych w kontekście ich zastosowania w terapii nowotworowej”, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano(&)BioMateriały - od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń
83. J. Szechyńska, K. Szczepanowicz „Projektowanie wielowarstwowych kapsulek do wykorzystania w terapii przeciwnowotworowej”, Nowe Trendy w Badaniach Naukowych - Wystąpienie Młodego Naukowca - Edycja IX, 9-10.10.2024 on line
84. K. Szczepanowicz, T. Kruk, P. Warszyński „Multiwarstwowe nanonośniki substancji aktywnych”, XI Konferencja Naukowa "Innowacje w praktyce", 06-07.06.2024 Lublin
85. K. Szczepanowicz, M. Szczęch, M. Procner, M. Leśkiewicz, M. Regulska, N. Łopuszyńska, K. asiński, L. Szyk-Warszyńska, W. Węglarz, W. Lasoń, P. Warszyński "Theranostic Nanocarriers to the Central Nervous System Therapies", 5<sup>th</sup> International Conference on Nanomaterials, Nanofabrication and Nanocharacterization (NANOMACH 2024), 18-24.04.2024 Oludeniz, Turkiye
86. D. Święch, P. Jabłoński, M. Gajewska, G. Palumba, M. Oćwieja, N. Piergies "Nanoscale Exploration: AFM-IR imaging of cysteine adsorption on gold nanoparticles", XVIIth International Conference on Molecular Spectroscopy, 22-25.09.2024 Wojanów, Poland

87. D. Święch, G. Palumbo, A. Golda, J. Kozieł, N. Piergies, M. Oćwieja “Advanced spectroscopic analysis of modified metallic surfaces for biomedical applications”, 28<sup>th</sup> International Conference of Raman Spectroscopy (ICORS), 28.07-02.08.2024 Rome, Italy
88. D. Święch, G. Palumbo, M. Oćwieja, A. Golda, J. Kozieł, C. Paluszkiewicz, N. Piergies “Nano-spectroscopic studies on the modified metallic surfaces for implantology application”, Eu-NanoSpec European Meeting on InfraRed NanoSpectro-Imaging, 12-15.03.2024 Orsay, France
89. M. Tataruch, A. Kluza, V. Illeová, T. Borowski, P. Cabadaj, M. Polakovič “S-1-(4-hydroxyphenyl)-ethanol dehydrogenase from *A. aromaticum*: catalytic stability studies”, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
90. W. Tomal, K. Szczepanowicz “Manufacturing of three-dimensional, functional nanomaterials with controlled release of active substance for personalized medicine”, 12<sup>th</sup> International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2024, 21-24.08.2024 Uzhhorod, Ukraine
91. Ł. Witkowski, A. Wiertel-Pochopień, D. Kosior, J. Zawała "A new method for measuring bubble velocity as a tool for water quality analysis", XII Ogólnopolska Konferencja Naukowa Inżynieria Chemiczna i Procesowa dla Środowiska i Medycyny, 11-14.09.2024 Sarbinowo
92. A. Wojtkiewicz “Enzymatic Production of Glochidone: A Therapeutic and Cosmetic Bioactive Compound with Anti-Aging Potential”, E-Congress European Society of Applied Biocatalysis 2<sup>nd</sup> Edition, 25-27.11.2024 online
93. A. Wojtkiewicz “TriBioSterA — Triterpene Bio-production for Healthier Steroid Alternatives”, Life Science Open Space Summit 2024, 27-28.11.2024 Kraków, Poland
94. A. Wojtkiewicz, G. Oleksy, M.A. Malinowska “Enzymatic Production of Bioactive Pentacyclic Triterpenes: A Case Study of Upcycling”, 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
95. A. Wróblewska, B. Szermer-Olearnik, A. Szczygieł, J. Mierzejewska, K. Węgierek-Ciura, D. Kozieł, Z. Pędzich, P. Żeliszewska, P. Migdał, R. Kruszakin, E. Pajtasz-Piasecka „Macrophages as potential boron carbide carriers in boron neutron capture therapy”, 20<sup>th</sup> International Congress on Neutron Capture Therapy (ICNCT 20), 24-28.06.2024 Kraków, Poland
96. C. Xu, S.G. Calhoun, E.B. Mock, J. Zawała, G.G. Fuller “Antifoam hinders air release in lubrication oil”, 2024 AIChE Annual Meeting, 27-31.10.2024 San Diego, USA
97. C. Xu, S.G. Calhoun, E.B. Mock, J. Zawała, G.G. Fuller “Antifoam hinders air release in lubrication oil”, 98<sup>th</sup> ACS Colloids and Surface Science Symposium, 23-26.06.2024 Washington, USA
98. M. Zaleski “Copper@Silver nanowires for conductive inks and pastes”, Evonik Winter School, 18-22.11.2024 Essen, Germany

99. M. Zimowska, M. Śliwa, H. Pálková, R. P. Socha, P. Niemiec "Efficiency and factors affecting basic properties of smectite-derived porous composites", LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
100. M. Zimowska, M. Śliwa, R.P. Socha "Nanostructured mineral-based hybrid composites for energy-related applications", 11<sup>th</sup> Mid-European Clay Conference (MECC'24), 15-20.09.2024 Plzen, Czech Republic

## POSTERY

1. A. Baliś, G. Gochev, D. Truzzolillo, J. Zawala "Stabilization of W/W (PEG/DEX) emulsions by  $\beta$ -lactoglobulin nanogel particles: Influence of polymer molecular mass and particle size", 19<sup>th</sup> Food Colloids Conference, 14-18.04.2024 Thessaloniki, Greece
2. J. Barbasz "Evaluation the multilayer scanner for LBC cytology using software with deep learning neural networks (UNet, VGG) and fuzzy logic approach", IGCS 2024 Annual Global Meeting, 16-18.10.2024 Dublin, Ireland
3. J. Barbasz "Innovative Metalworking System Based on Advanced Big Data Analysis", 33<sup>rd</sup> International Conference on Metallurgy and Materials, 22-25.05.2024 Brno, Czech Republic
4. J. Barbasz, K. Sofińska, P. Bicz "Innovative Metalworking System Based on Advanced Big Data Analysis", 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
5. S. Baumgart, D. Kupczyk, M. Przybysz, W. Płaziński, R. Studzińska „Spiro-cycloalkyl 2-aminothiazol -4(5H)-one Derivatives as selective 11 $\beta$ -HSD1 inhibitors", 3<sup>rd</sup> International Conference "Chemistry for beauty and health", 13-15.06.2024 Kraków
6. B. Blyzniuk, A. Dziwoki, K. Freindl, Ewa Madej, E. Młyńczak, D. Wilgocka-Ślęzak, J. Korecki, N. Spiridis "True resistivity in magnetite epitaxial ultra-thin films" 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 07–12.07.2024 Perugia, Italy
7. S. Bujok, Ł. Bratasz "Risk of mechanical damage to heritage PVC objects: influence of plasticiser migration", 2024 Scientific Methods in Cultural Heritage Research (Advances and Challenges in Heritage Materials Characterization and Data Interpretation), 07-12.07.2024 Les Diablerets, Switzerland
8. S. Bujok, T. Pańczyk, K. Szutkowski, D. Anioł, S. Antropov, K. Kruczała, Ł. Bratasz "Migracja plastyfikatorów w obiektach dziedzictwa wykonanych z poli(chlorku winylu): aspekty mechaniczne i środowiskowe", Analiza Chemiczna w Ochronie Zabytków AChwOZ'XXIV, 28-29.11.2024 Warszawa
9. M. Bzówka, K. Szleper, A. Stańczak, T. Borowski, G. Tanriver, K. Mituśińska, A. Selvaram Thirunavukarasu, A. Raczyńska, W. Bagrowska, J. Brezovsky, A. Góra „Water molecules as a key for enzymes interior understanding and reshaping", Biocatalysis Faraday Discussion, 22-24.05.2024 London, United Kingdom
10. E. Cichoń, K. Kosowska, P. Pańtak, J. Czechowska, A. Zima, A. Ślósarczyk "Enhancing Biomicroconcretes: The Role of Surface Modifications on Hydroxyapatite-Based Granules for Improved Biomedical Applications", Infrared Nanoscopy Workshop on Biological and Polymer Nanomaterials, 24-26.04.2024 Kraków

11. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik "Small molecules binding by (M-Por)<sub>2</sub> dimers (M = Fe, Ni, Mn, Co): DFT Studies", LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
12. A. Drzewiecka-Matuszek, D. Rutkowska-Żbik "Cooperativity of binuclear transition metal sites - N<sub>2</sub>O activation", Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland
13. A. Faruga, J. Prajsnar, R. Karcz, M. Guzik "Upgrading bioplastic via a fermentation process", 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
14. K. Górecki, S. Bujok, Ł. Bratasz, K. Kruczała "The effect of plasticiser type on the thermal degradation of poly(vinyl chloride): multimodal spectroscopic analysis", MoDeSt 2024: 11<sup>th</sup> Conference of the Modification, Degradation, Stabilization of Polymers Society, 01-04.09.2024 Palermo, Italy
15. K. Górecki, S. Bujok, K. Kruczała "Understanding the Thermal Degradation of Poly(vinyl chloride) Plasticisers– a Case Study of Key Representatives", LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
16. B. Grygier, K. Kamińska, K. Szczepanowicz, P. Warszyński, W. Lasoń, A. Basta-Kaim „Wpływ wolnego ederavonu i ederavonu zamkniętego w nanokapsułkach na hodowle organotypowe hipokampa w modelu udaru niedokrwienego mózgu”, Pierwsze Dni Farmakologii Polskiej, 26-29.05.2024 Ustroń-Jaszowiec
17. A.L. Harmat, D. Tolmachev, A. Scacchi, P. Batys, M. Sammakorpi "Computational insight to self-assembling materials based on silk-like modular protein constructs", 38<sup>th</sup> Conference of the European Colloid & Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copenhagen, Denmark
18. O. Hotsanoha, K. szczepanowicz, T. Kruk „Formowanie, modyfikacja i osadzanie tlenku grafenu (GO) oraz hybryd GO z polielektrolitami/nanocząstkami metalicznymi na powierzchni złota”, VI Interdyscyplinarna Konferencja Nano (&) BioMateriały - od teorii do aplikacji, 12-14.06.2024 Toruń
19. M. Husain, D. Rutkowska-Zbik, T. Korona „Zastosowanie metod topologii kwantowej do opisu stanów wzbudzonych porfiryn”, 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań,
20. M. Husain, D. Rutkowska-Żbik, T. Korona "Exploring the excitation effects of fluorine and cobalt substitution on porphine using quantum chemistry topology", Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland
21. M. Jamroży, M. Krzan „Opracowanie nowoczesnych biosurfaktantów na bazie saponiny”, Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa „Blżej Chemii", 12-13.01.2024 Kraków
22. 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", 28<sup>th</sup> International Conference of Raman Spectroscopy (ICORS), 28.07-02.08.2024 Rome, Italy

23. J. Kaim, M. Śliwa, Ł. Kuterasiński, K. Samson, M. Ruggiero-Mikołajczyk, M. Zimowska, G. Mordarski, R. Karcz, D. Rutkowska-Żbik "Gas-phase hydrogenation and decarbonylation of furfuryl aldehyde over catalysts containing Cu and Ni", LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, LVI Polish Annual Conference on Catalysis, 20-22.03.2024 Kraków
24. D.S. Kharytonau, E. Jarek, K. Skowron, M. Zimowska, I. Dobryden, N. Almqvist "Corrosion and nanomechanical properties of Mo-coordinated chitosan coatings on Mg alloy WE43", 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
25. D.S. Kharytonau, E. Jarek, M. Zimowska, J. Ryl, I. Dobryden, N. Almqvist "Corrosion and Nanomechanical Properties of Chitosan-based Coatings on Biodegradable Mg Alloys", 22<sup>nd</sup> International Corrosion Congress, 22-26.10.2024 Xi'an, China
26. D.S. Kharytonau, G. Mordarski, K. Skowron, V. Chaprasava, E. Jarek, M. Zimowska, N. Almqvist "Corrosion performance and nanomechanical properties of polylactic acid coatings on WE43 magnesium alloy", 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
27. W. Kieres, M. Jamroży, S. Kudlacik-Kramarczyk, M. Krzan "Interactions of saponins at the water-air and water-oil interfaces with chemical compounds as donors or acceptors of hydrogen bonds and their role in emulsion stabilization", 3<sup>rd</sup> International Conference "Chemistry for beauty and health", 13-15.06.2024 Kraków
28. W. Kieres, S. Kudlacik-Kramarczyk, M. Jamroży, M. Krzan "Interactions of Saponin with Hydrogen Bond Donor or Acceptor Compounds at Water-Air and Water-Oil Interfaces: Influence on Emulsion Stability", 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
29. T. Kruk, O. Hotsanoha, K. Szczepanowicz "Modification and deposition of graphene oxide (GO) on gold surface as a platform increasing sensitivity and stability for a new type of immunosensors", NanoBio&Med2024 International Conference, 05-07.11.2024 Barcelona, Hiszpania
30. M. Krzan, W. Kieres, M. Jamroży, S. Kudlacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, P. Warszyński, "Adsorption of saponin at water-air and water-oil interfaces in the presence of chemical compounds that are hydrogen bond donors or acceptors and their effect on the emulsion stability", 15<sup>th</sup> European Foam Conference (EUFOAM), 30.06-04.07.2024 Dresden, Germany
31. M. Krzan, W. Kieres, M. Jamroży, S. Kudlacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, P. Warszyński, B. Braunschweig "The impact of chemical compounds on the stability of saponin emulsions", 38<sup>th</sup> Conference European Colloid and Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copanhamen, Denmark
32. A. Kornas, E. Tabor, J. Dedecek, K. Mlekodaj, A. Drzewiecka-Matuszek, M. Smoliło-Utrata, K. Samson, M. Śliwa, D. Rutkowska-Żbik "DFT studies of O<sub>2</sub> activation by Fe, Ni, and Co bi-metallic sites for valorization of C1-C3 alkanes", International Symposium Catalytic Chemistry of C1 Molecules, C1Chem, 10-12.07.2024 Lille, France
33. D. Kosior, G. Gochev, P. Batys, Ł. Witkowski, P. Warszyński, J. Zawala „Efekt par organicznych na właściwości powierzchni międzyfazowej ciecz/gaz w warunkach statycznych i dynamicznych”, XI Konferencja Naukowa "Innowacje w praktyce", 06-07.06.2024 Lublin

34. P. Kozioł, A. Pajor-Świerzy, K. Szczepanowicz, R. Dziedzic „Laserowe spiekanie nanocząstek bimetalicznych Ni-Ag do zastosowania w nowoczesnej elektronice”, XIV Sympozjum Techniki Laserowej, 09-13.09.2024 Zamek Ryn
35. A. Kluza, B. Mrugała, K. Kurpiewska, P. Porębski, E. Niedziałkowska, W. Minor, M. Weiss, M. Chruszcz, T. Borowski, Z. Wojdyła “Structural studies on non-heme iron-dependent metalloproteins”, EMBO Practical Course: Time-resolved macromolecular serial crystallography, 08-12.07.2024 Grenoble, France
36. K. Kruczała, M. Bucki, M. Saad, K. Górecki, D. Pawcenis, S. Bujok, Ł. Bratasz “Effects of Artificial Ageing on Plasticized Poly(vinyl chloride)”, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
37. M. Krzan, P. Warszyński “Mechanism of saponin-chitosan complexes formation – a molecular dynamics study”, 15<sup>th</sup> European Foam Conference (EUFOAM), 30.06-04.07.2024 Dresden, Germany
38. S. Kudłacik-Kramarczyk, A. Drabczyk, A. Przybyłowicz, M. Krzan “Comprehensive physicochemical characteristics of flaxseed-based oleogels”, 38<sup>th</sup> Conference European Colloid and Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copenhagen, Denmark
39. Ł. Kuterasiński, A. Biessikirski, S. G. Atlagić, M. Pytlik, M. Dworzak, M. Twardosz, M. Cała, J. Jakóbczyk, S. Sukur, A. Stopkowicz, A. Baziak, B. D. Napruszewska “On the influence of the iron content in microstructured charcoal additives on the physicochemical properties of ANFO-based explosives”, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
40. Ł. Kuterasiński, A. Biessikirski, S. G. Atlagić, M. Pytlik, M. Dworzak, M. Twardosz, M. Cała, J. Jakóbczyk, S. Sukur, A. Stopkowicz, A. Baziak, B. D. Napruszewska “On the influence of the iron content in microstructured charcoal additives on the physicochemical properties of ANFO-based explosives”, XXIV Zeolite Forum, 04-08.06.2024 Będlewo
41. N. Kwiatek, E. Madej, D. Wilgocka-Ślęzaka, K. Freindl, M. Zając, J. Korecki, N. Spiridis “Correlations of chemical and magnetic properties in cobalt/magnetite and cobalt/hematite epitaxial heterostructures”, 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 7-12.07.2024 Perugia, Italy
42. I. Leszczyńska, P. Batys, Ł. Lamch, K.A. Wilk, P. Warszyński “Molecular Dynamics Studies of Multicharged Surfactants and Their Complexes with Polyelectrolytes”, 38<sup>th</sup> Conference of the European Colloid & Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copenhagen, Denmark
43. I. Leszczyńska, P. Batys, Ł. Lamch, K.A. Wilk, P. Warszyński “Molecular Dynamics Studies of Dicapalic and Quadruple-Head Cationic Surfactants and Their Complexes with Anionic Polyelectrolytes”, 38<sup>th</sup> Conference of the European Colloid & Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copenhagen, Denmark
44. V. Lutsyk, P. Wolski “Glycosidic Linkage Conformations Across Various Force Fields: Comparative Analysis and Monte Carlo Modeling”, IX Current Trends in Theoretical Chemistry, 01-05.09.2024 Kraków, Poland

45. R. Meenambal, K. Jakubowska, T. Kruk, P. Warszyński, D. Jantas "Probe into neuroprotective effects of polyacrylic acid (PAA)-conjugated cerium oxide against MPP<sup>+</sup>-induced cell damage in SH-SY5Y cells", 16<sup>th</sup> International Symposium "Molecular basis of pathology and therapy in neurological disorders, 17-18.10.2024 Warszawa
46. A. Micek-Ilnicka, N. Ogródowicz, M. Zimowska, E. Lalik, M. Ruggiero-Mikołajczyk „Niekonwencjonalna metoda badania kwasowości stałych katalizatorów GC vs. IR vs. mikrokalorymetria”, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
47. J. Mierzejewska, S. Cudziło, B. Szermer-Olearnik, A. Wróblewska, A. Szczygieł, P. Żeliszewska, K. Węgierek-Ciura, A. Rapak, E. Pajtasz-Piasecka "Functionalized boron nitride nanoparticles as boron carriers in boron neutron capture therapy", 20<sup>th</sup> International Congress on Neutron Capture Therapy (ICNCT 20), 24-28.06.2024 Kraków, Poland
48. K. Mlekodaj, A. Kornaś, E. Tabor, J. Dedecek, M. Smoliło-Utrata, K. Samson, M. Śliwa, D. Rutkowska-Żbik "Low temperature propane oxidative dehydrogenation over Fe-ferrierite", 18<sup>th</sup> International Congress on Catalysis, 14-19.07.2024 Lyon, Francja
49. J. Mokrzycki, M. Guzik, J. Kryściak-Czerwenka, D. Duraczyńska, R. Karcz "Cryptomelane (K-OMS-2) enriched with copper as efficient catalysts for toluene combustion", International Conference Energy Fuels Environment (EFE2024), 26-28.06.2024 Kraków, Poland
50. M. Oćwieja, P. Smoleń, A. Barbasz, N. Piergies "The impact of gallic and rosmarinic acid on the physicochemical and biological properties of selected metal nanoparticles", XI Conference of Nanotechnology, 30.06-05.07.2024 Lublin, Poland
51. A. Pajor-Świerzy, K. Kozak, D. Duraczyńska, K. Szczepanowicz "The conductive materials based on nickel@silver core@shell nanoparticles for application in the printed electronic industry", 66. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 15-20.09.2024 Poznań
52. B. Pantelic, C. Venkateswara Rao, J. Nikodinovic-Runic, T. Ilic-Tomic, D. Milivojevic, M. Guzik, M. Ponjavic "Development and characterization of novel biobased polyurethane films reinforced with bacterial biomass", 19<sup>th</sup> International Symposium on Biopolymers (ISBP 2024), 20-24.10.2024 Penang Island, Malaysia
53. K. Piechowska, M. Mizerska-Kowalska, B. Zdzisińska, J. Cytarska, A. Baranowska-Łączkowska, K. Jaroch, K. Łuczykowski, W. Płaziński, B. Bojko, S. Kruszewski, K. Misiura, K.Z. Łączkowski "Tropinone-thiazole derivatives as anticancer agents", 3<sup>rd</sup> International Conference "Chemistry for beauty and health", 13-15.06.2024 Kraków
54. J. Podobiński, M. Śliwa, Ł. Kuterasiński, J. Datka "Quantitative IR studies of basic sites on catalysts", XXIV Zeolite Forum, 04-08.06.2024 Będlewo
55. J. Podobiński, M. Śliwa, D. Rutkowska-Żbik, J. Datka "Quantitative IR studies of basic sites on catalysts", 18<sup>th</sup> International Congress on Catalysis, 14-19.07.2024 Lyon, Francja
56. J. Prajsnar, W. Snoch, R. Bugno, K. Stępień, M. Guzik "PHA monomers in the biosynthesis of small biologically active molecules", 19<sup>th</sup> International Symposium on Biopolymers (ISBP 2024), 20-24.10.2024 Penang Island, Malaysia

57. L. Rieder, A.K. Hönikl, V. Holzschuster, A. Rindler, D. Sebe, M. Winkler, T. Borowski, A. Góra, M. Sørli, A. Glieder “Copper enzymes for sustainable, modern chemistry”, UPO 2024 First Minisymposium on Peroxygenase Discovery, Engineering, Production and Application, 26.06.2024 Rogner Bad Blumau, Austria
58. M. Ruggiero-Mikołajczyk, G. Mordarski, P. Michorczyk, B. Michorczyk, M. Zimowska “The role of modification of anode materials intended for use in SOFCs in the reaction of methane reforming”, LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
59. M. Ruggiero-Mikołajczyk, G. Mordarski, P. Michorczyk, B. Michorczyk, M. Zimowska “The role of modification of anode materials used in high temperature solid oxide fuel cells SOFCs, in the reaction of methane reforming”, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
60. D. Rutkowska-Żbik, A. Drzewiecka-Matuszek, V. Kainpachery, R. Tokarz-Sobieraj “DFT Studies on Single Atom and Sub-nanometer Copper Clusters Deposited on Titania for Hydrogen Evolution Reaction”, 12<sup>th</sup> European Conference on Solar Chemistry and Photocatalysis: Environmental Applications (SPEA12), 17-21.06.2024 Belfast, United Kingdom
61. D. Rutkowska-Żbik, V. Kainpachery, R. Tokarz-Sobieraj “Methane Oxidative Coupling on Au-TiO<sub>2</sub> Catalyst: DFT studies”, 18<sup>th</sup> International Congress on Catalysis, 14-19.07.2024 Lyon, Francja
62. D. Rutkowska-Żbik, U. Mazurska, G. Stochel, Ł. Orzeł “Predicting interactions between vitamin B12 derivatives and transport proteins by molecular docking”, Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland
63. M. Saad, M. Bucki, S. Bujok, D. Pawcenis, T. Rijavec, K. Górecki, Ł. Bratasz, I. Kralj Cigić, M. Strlič, K. Kruczala “Effect of accelerated thermal degradation of poly(vinyl chloride): the case of unplasticised PVC”, MoDeSt 2024: 11<sup>th</sup> conference of the Modification, Degradation, Stabilization of Polymers Society, 01-04.09.2024 Palermo
64. R. Sarsembekova, K. Szymczyk, M. Krzan, P. Brewczak, S. Aidarova, B. Malinowska, K. Terpilowski “Determination of volumetric properties of non-ionic surfactants used in industry for the preparation of cleaning products”, 24<sup>th</sup> International Symposium Surfactants in Solution, 16-21.06.2024 Pilani, Goa, India
65. B. Samojeden, D. Duraczyńska, M. Motak “Characterization and Catalytic Performance of Manganese, Iron, Copper, and Nickel-Promoted Cenospheres in Selective Reduction of NO by Ammonia (SCR-NH<sub>3</sub>)”, International Conference Energy Fuels Environment (EFE2024), 26-28.06.2024 Kraków, Poland
66. S. Shaju, A. Surendran, D. Wilgocka-Ślęzak, E. Madej, N. Spiridis, J. Korecki, E. Młyńczak “Magnetic properties of the epitaxial thin films of Fe<sub>x</sub>Sn<sub>y</sub>”, 25<sup>th</sup> International Colloquium on Magnetic Films and Surfaces (ICMFS2024), 07-12.07.2024 Perugia, Italy
67. P. Sharma “Facile engineering of (CnNn+x), with unconventional plasmonic materials with single atom for sustainable H<sub>2</sub> production”, Joint Meeting of PSRS Members and SOLARIS Centre Users, 11-13.09.2024 Kraków, Poland

68. P. Sharma, D. Rutkowska-Żbik, P. Warszyński "Facile engineering of (CnNn+x), with unconventional plasmonic materials with single atom for sustainable H<sub>2</sub> production", LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
69. S. Škaro Bogojević, J. Simić, S. Jeremić, J. Nikodinović-Runić, M. Guzik, M. Ponjavić "Greener extraction of intracellular poly(3-hydroxybutyrate) from *Zobellella denitrificans* biomass using enzyme cocktails and deep eutectic solvents", E-Congress European Society of Applied Biocatalysis 2<sup>nd</sup> Edition, 25-27.11.2024 online
70. K. Skowron, G. Mordarski, D. Kharytonau, E. Dryzek, M. Zimowska "Influence of Surface Nanocrystallization of Mg Substrate on Structure and Corrosion Resistance of Phosphate Conversion Coatings", 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
71. W. Snoch, M. Stankiewicz, K. Szczepanowicz, I. Aleksic, M. Guzik "Designing a functional nanoemulsion using lactose esters and modified monomers of bacterial polyhydroxyalkanoates to improve the anticancer activity of SN-38", 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
72. S. Sowa, M. Zubik-Duda, A. Brzyska, D. Kamiński "Effect of 3-aryl substituent on fluorescent properties of benzo[b]phosphole oxides", XXV International Symposium "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds", 21-22.11.2024 Łódź, Poland
73. K. Stachurski, K. Jasiński, T. Dedriksen, J. Yang, A. Lind, P. Warszyński, N. Łopuszyńska, W.P. Węglarz "MRI Contrast Properties of POSS-based and Cerium Oxide-based Nanoparticles for Potential Theranostic Applications", Small Animal & Red Hot 19F MRI Symposium (SAMS2024), 02-04.12.2024 Goettingen, Niemcy
74. K. Stachurski, N. Łopuszyńska, K. Jasiński, T. Dedriksen, J. Yang, A. Lind, P. Warszyński "MRI relaxation and Contrast Properties of Cerium Oxide Nanocarriers and Their Theranostic Functionality", European Molecular Imaging Meeting (EMIM-2024), 11-15.03.2024 Porto, Portugal
75. K. Stańkiewicz, J. Prajsnar, A. Lenart-Boroń „Analiza metataksonomiczna wody na etapach produkcji sztucznego śniegu w stacjach narciarskich”, VIII Ogólnopolskie Sympozjum Mikrobiologiczne „Metagenomy różnych środowisk”, 17-18.06.2024 Lublin
76. A. Sultan, M. Bilal Hanif, D. Kharytonau, K. Zheng "Effect of Ni, Co, and Cu–Doping in BCY Electrodes for Solid Oxide Fuel Cells: Microstructural and Electrical Properties", 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
77. S. Sułkowski, D. Rutkowska-Żbik, G. Stochel, Ł. Orzeł "Palladium(IV) complexes as potential precursors of cytostatics – synthesis and characterization", Chemistry Towards Biology (ChTB11), 01-04.07.2024 Kraków, Poland
78. A. Surendran, S. Shaju, J. Kanak, W. Powroźnik, A. Wawro, E. Beyer, J. Korecki, N. Spiridis, E. Młyńczak "Electronic properties of the epitaxial thin films of Fe<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>", Topological Matter School 2024, 19-23.08.2024 San Sebastian, Spain

79. M. Szaleniec, Y. Gemmecker, A. Winiarska, D. Hege, J. Heider "Benzyl alcohol dehydrogenase from *Aromatoleum aromaticum* EbN1 - a pH-dependent shift of NAD/NADP cofactor specificity", E-Congress European Society of Applied Biocatalysis 2<sup>nd</sup> Edition, 25-27.11.2024 online
80. M. Szaleniec, G. Oleksy, A. Sekuła, I. Aleksić, K. Krämer, A. Pierik, J. Heider "The Initiation Phase of the Catalytic Cycle in the Glycyl-Radical Enzyme Benzylsuccinate Synthase – Modelling and Experiment", 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
81. D. Szarpak, Ł. Lamch, W. Szczęsna-Górniak, P. Warszyński "Determination of Hansen Solubility Parameters of Novel Cationic Dicephalic Surfactants", 38<sup>th</sup> Conference of the European Colloid & Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copanhamen, Denmark
82. K. Szczepanowicz, M. Szczęch, T. Kruk, M. Procner, P. Warszyński "Sequential adsorption of charged nanoobjects as a method of formation of drug delivery systems", NanoBio&Med2024 International Conference, 05-07.11.2024 Barcelona, Hiszpania
83. W. Szczęsna-Górniak, Ł. Lamch, D. Długowska, P. Warszyński, K.A. Wilk "Complexes of anionic polyelectrolytes and cationic dicephalic surfactant as novel drug delivery systems", 38<sup>th</sup> Conference of the European Colloid & Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copanhamen, Denmark
84. J. Szechyńska, T. Kruk, K. Szczepanowicz „Badania dotyczące kapsułek warstwowych w kontekście ich potencjalnego wykorzystania w leczeniu. nowotworowej”, XV International Scientific Conference "Horyzonty Nauki", 07-08.06.2024 Kraków, Poland
85. J. Szechyńska, M. Rak, K. Szczepanowicz „Opracowanie kapsułek warstwowych w kontekście ich zastosowania w terapii nowotworowej”, IV Ogólnopolska Studencka Konferencja Naukowa "Blżej Chemii", 12-13.01.2024 Kraków
86. A. Szymaszek-Wawryca, P. Summa, U. Diaz, D. Duraczyńska, B. Samojeden, M. Motak "Natural and synthetic zeolites modified with Fe and Cu as catalysts for selective catalytic reduction of nitrogen oxides with ammonia", 16<sup>th</sup> Pannonian International Symposium on Catalysis, 01-05.09.2024 Seggau, Austria
87. M. Tataruch, P. Wójcik, A. Kluza, M. Polaković "Thermal inactivation of KSTD1 from *Rhodococcus erythropolis* – preliminary studies", 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
88. R. Tokarz-Sobieraj, D. Rutkowska-Żbik „Nanoklastery metaliczne Pd/Pt zakotwiczone na wolframowych anionach Keggina, jako katalizatory w reakcjach uwodornienia. Obliczenia DFT.", LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne, 20-22.03.2024 Kraków
89. A. Wojtkiewicz, K. Zaręba "Bioinformatic analysis of 3-ketosteroid dehydrogenases family: in between the sequence & substrate specificity", 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry BPCI2024, 17-21.06.2024 Kraków, Poland
90. M. Zaleski, K. Szczepanowicz, A. Pajor-Świerzy, P. Warszyński "Development of conductive inks and of conductive printed patterns on its basis", 38<sup>th</sup> Conference of the European Colloid & Interface Society, ECIS 2024, 01-06.09.2024 Copanhamen, Denmark

91. M. Zimowska, D. Kharytonau, K. Skowron, G. Mordarski “In situ formation of LDH-based nanocontainers on Zn alloy – a detailed investigation of their morphology and structure”, 11<sup>th</sup> Mid-European Clay Conference (MECC’24), 15-20.09.2024 Plzen, Czech Republic
92. M. Zimowska, D. Kharytonau, K. Skowron, G. Mordarski, L. Szyk-Warszyńska, J. Krupa, J. Adamiec, S. Zimowski ”Structure evolution, adhesion and mechanical properties of nanostructural layered double hydroxide coatings developed on Zn alloy”, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
93. M. Zimowska, D.S. Kharytonau, K. Skowron, G. Mordarski, S. Zimowski “Factors influencing the growth of layered double hydroxide layers on Zn alloy for smart corrosion protection”, 61<sup>st</sup> Annual Meeting of The Clay Minerals Society and 5<sup>th</sup> Asian Clay Conference, 03-07.06.2024 Manoa, USA
94. M. Zimowska, M. Śliwa, H. Pálková, M. Ruggiero-Mikołajczyk, J. Gurgul, K. Łątka, R.P. Socha “Ex situ spectroscopic studies of microwave-processed mineral nanohybrid composites for energy-related applications”, 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface (ISSIS), 05-07.06.2024 Kraków, Poland
95. S. Zimowski, M. Zimowska, D.S. Kharytonau, K. Skowron, “Adhesion and micromechanical properties of nanostructural layered double hydroxide coatings developed on Zn alloy for smart corrosion protection”, 61<sup>st</sup> Annual Meeting of The Clay Minerals Society and 5<sup>th</sup> Asian Clay Conference, 03-07.06.2024 Manoa, USA, p. A 129

## WYKŁADY W INSTYTUCJACH I TOWARZYSTWACH NAUKOWYCH

- 1 Ł. Bratasz "HERIe - preventive conservation platform", Uniwersytet Boloński, Włochy
- 2 Ł. Bratasz, S. Bujok, Ł. Berger "HERIe – cyfrowa platforma prewencji konserwatorskiej wspierająca podejmowanie decyzji", Uniwersytet Warszawski, Uniwersytet Mikołaja Kopernika
- 3 Ł. Bratasz, S. Bujok, S. Antropov, M. Bury, M. Strojecki, K. Poznańska, R. Kozłowski, M. Łukomski, M. Soboń, Ł. Berger „HERIe – cyfrowa platforma prewencji konserwatorskiej wspierająca podejmowanie decyzji”, Zamek Królewski na Wawelu, Kraków
- 4 Ł. Bratasz, S. Bujok "Risk of mechanical damage to collections", Royal Academy of Art, Kopenhaga
- 5 Ł. Bratasz, M. Soboń, M. Łukomski, Ł. Berger, M. Strojecki "HERIe – a digital preventive conservation platform", the Getty Conservation Institute, Los Angeles
- 6 Ł. Bratasz, M. Strojecki, Ł. Berger "HERIe – a digital preventive conservation platform, Uniwersytet Yale, New Haven"
- 7 T. Borowski “Chemia i komputery” wykład popularnonaukowy dla klasy 1 LO w Gromniku
- 8 T. Borowski "Our successes and failures in studies on non-heme iron enzymes – some examples” “Crossing Borders Building Connections” Symposium, Politechnika Śląska
- 9 T. Borowski “Satellite Workshop : Enzyme Modeling and Substrate Docking European Summit of Industrial Biotechnology” (esib) November 12 - November 14, 2024, Graz University of Technology, Austria
- 10 D. Duraczyńska ""To be or not to be an EU expert?" wygłoszony (via Webex) w ramach "Horizon Europe Navigators MeetUp series" 19.09.2024 r. Wydarzenie zorganizowane przez Biuro Promocji Nauki PolSCA Polskiej Akademii Nauk w Brukseli.,
- 11 L. Krzemień "Latest development in the speckle interferometry." Getty Institution
- 12 E. Młyńczak "Electronic properties of the epitaxial thin films of a kagome ferromagnet  $\text{Fe}_3\text{Sn}_2$ ", Instytutu Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie
- 13 E. Młyńczak „Wzrost oraz właściwości strukturalne i elektronowe ultracienkich warstw Sn na Pt(111)”, Instytut Fizyki Doświadczalnej Uniwersytet Wrocławski
- 14 M. Oćwieja „Użyteczność reakcji wymiany ligandów w modelowaniu aktywności biologicznej nanocząstek metali”, Uniwersytet Komisji Edukacji Narodowej w Krakowie
- 15 M. Oćwieja "Srebrne NanoCudeńka – czyli .... „lecimy w kulki”, Zespół Szkół Ogólnokształcących i Zawodowych w Gromniku
- 16 M. Ruggiero-Mikołajczyk "Fuel cells and BET measurement as my research topics" podczas pobytu w Institute of Separation Science & Technology, Department of Chemical and Biological Engineering (CBI), Friedrich-Alexander-University Erlangen-Nürnberg, Niemcy
- 17 D. Rutkowska-Żbik „O sportach lotniczych i nurkowaniu, czyli prawa gazowe w praktyce”, Zespół Szkół Ogólnokształcących i Zawodowych w Gromniku
- 18 M. Strojecki, L. Krzemień "Principles of Speckle Interferometry and Acoustic Emission" on "Changing Climate Management Strategies" The Getty Conservation Insitute and Victoria and Albert Museum

- 19 M. Szaleniec "Molybdenum and tungsten containing oxidoreductases – fundamental and applied studies", van 't Hoff Institute for Molecular Science (HIMS) at the Faculty of Science of the University of Amsterdam, Holandia
- 20 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 Christian Leppin "A fast (modulation) QCM-D to resolve kinetics and to study electrochemical processes"
2. dr hab. Żaneta Świątkowska-Warkocka (Zakład Materiałów Magnetycznych i Nanostruktur IFJ PAN) „Tworzenie się cząstek kompozytowych w procesie naświetlania laserem impulsowym"
3. prof. dr hab. inż. Tomasz Wasilewski (Wydział Inżynierii Chemicznej i Towaroznawstwa Uniwersytetu Technologiczno-Humanistycznego w Radomiu) „Implementacja wyników badań naukowych do praktyki przemysłowej na przykładzie przemysłu kosmetycznego i detergentowego"
4. dr Marcin Strzelecki (Akademia Muzyczna w Krakowie) "AI i muzyka – między człowiekiem a technologią"
5. dr hab. Paweł Rejmak (Środowiskowe Laboratorium Badań Rentgenowskich i Elektromikroskopowych Instytutu Fizyki PAN) „Charakteryzacja niebieskich i czerwonych ultramaryn metodami obliczeniowymi"
6. prof. Sabu Thomas "Circular Economy: New Oportunities in Sustaible Green Nano Materials and Polymer Bio-Nanocomposites"
7. dr Aneta Lewkowicz (Wydział Fizyki oraz Wydział Kryminalistyki Uniwersytetu Gdańskiego) „Zastosowanie spektroskopii molekularnej w kryminalistyce"
8. prof. dr hab. Ryszard Tadeusiewicz "Popularyzacja nauki – dlaczego to robimy i jak to robimy?"
9. dr hab. Magdalena Malinowska (Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej) "Skarby winorośli - eliksir młodości w kontekście jednego z najstarszych dorobków cywilizacji"

### **WYKŁADY PRACOWNIKÓW INSTYTUTU**

1. dr hab. inż. Piotr Batys „Nanostrukturalne hybrydowe kompozyty mineralne do procesów katalitycznych zrównoważonego rozwoju"
2. prof. dr hab. Tomasz Borowski "Wyniki ankiety w akcji HR Strategy for Researchers (HRS4R) dotyczącej oceny pracowników naukowych IKiFP PAN"
3. dr hab. Jacek Gurgul „Spektroskopia elektronów XPS. Materiały termoelektryczne na bazie faz Zintl."
4. dr hab. Marcel Krzan "Physical-chemistry and rheology of Multiphase systems" - dotychczasowy dorobek naukowy i przyszłe plany badawcze
5. dr inż. Sonia Kudłacik-Kramarczyk „Kierunki badań w inżynierii chemicznej: hydrożele, surfaktanty i ich zastosowanie w medycynie i przemyśle"

6. dr hab. Małgorzata Zimowska “Nanostrukturalne hybrydowe kompozyty mineralne do procesów katalitycznych zrównoważonego rozwoju”

## UZYSKANE TYTUŁY I STOPNIE NAUKOWE

### PROFESORA

1. Jan Zawała

### DOKTORA HABILITOWANEGO

- 1 Marcel Krzan „Właściwości pianotwórcze i stabilność pian w układach wieloskładnikowych”
- 2 Łukasz Kuterasiński „Multifunkcjonalne układy  $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$  otrzymane z zastosowaniem sonochemii – synteza i charakterystyka fizykochemiczna”
- 3 Ewa Młyńczak „Fundamentalne właściwości elektronowe epitaksjalnych warstw Fe(001) osadzanych na Au(001)”
- 4 Maria Morga „Określenie mechanizmów adsorpcji i właściwości monowarstw polipeptydów na powierzchni substratów stałych”
- 5 Anna Pajor-Świerzy „Rozwinięcie metodologii otrzymywania materiałów przewodzących na bazie nanocząstek bimetalicznych o strukturze core@shell do zastosowania w nowoczesnej elektronice”

### DOKTORA

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

1. Justyna Andrys-Olek „Badania obliczeniowe nad syntazą ektoinową” (promotor prof. dr hab. Tomasz Borowski)
2. Mariusz Borkowski “Influence of liquid physicochemical properties on single bubble motion and stability of foam films and foams” (promotor prof. dr hab. Jan Zawała)
3. Magdalena Goncerz „Dendrymery poli(amidoaminowe) jako funkcjonalne systemy dostarczania leków przeciwnowotworowych - charakterystyka fizykochemiczna oraz aktywność biologiczna” (promotor: prof. dr hab. inż. Barbara Jachimska)
4. Natalia Kwiatek „Korelacje właściwości chemicznych i magnetycznych w epitaksjalnych heterostrukturach kobalt/magnetyt i kobalt/hematyt” (promotor prof. dr hab. Nika Spiridis)
5. Dorota Wierzchowiec „Wpływ ruchu kropeł i pęcherzyków na dynamikę koalescencji” (promotor prof. dr hab. Jan Zawała)

## **KONFERENCJE NAUKOWE (WSPÓŁ)ZORGANIZOWANE PRZEZ INSTYTUT**

- 1 LVI Ogólnopolskie Kolokwium Katalityczne (LVI Polish Annual Conference on Catalysis), Kraków, 20-22.03.2024 (IKiFP PAN)
- 2 7<sup>th</sup> International Symposium on Surface Imaging/Spectroscopy at the Solid/Liquid Interface, Kraków, 05-07.06.2024 (IKiFP PAN, Wydział Chemii UJ)
- 3 6<sup>th</sup> Symposium on Biotransformations for Pharmaceutical and Cosmetic Industry, Kraków, 17-19.06.2024 (IKiFP PAN, Wydział Technologii Żywności, UR w Krakowie)
- 4 Bioprocessing Workshop, Kraków, 19-21.06.2024 (Laboratorium Rozwoju Bioprocessów IKiFP PAN)
- 5 Sympozjum "Preventive conservation of paintings in heritage institutions", Kraków, 09.04.2024 (IKiFP PAN, Norweski Uniwersytet Nauki i Technologii, Wydział Inżynierii Mechanicznej i Przemysłowej, Trondheim, Wydział Konserwacji i Restauracji Dzieł Sztuki, ASP Kraków)

## **IMPREZY POPULARNO NAUKOWE**

1. Czynny udział w Festiwalu Nauki organizowanym na terenie UJ, Kraków, 16-18 maja 2024 r.

## **WYRÓŻNIENIA I NAGRODY**

1. prof. M. Witko – tytuł doktora honoris causa Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej
2. prof. M. Szaleniec - wybór na przewodniczącego Komisji ds. Kontaktu Nauka-Biznes w ramach Komitetu Chemii PAN
3. prof. J. Zawala - wybór na członka Komisji Nauk Inżynieryjno-Technicznych Oddziału PAN w Lublinie