

KSIĄŻKA ABSTRAKTÓW

ZJAZD WIOSENNY

03-07.05.2023



**Znajdź
nas na**

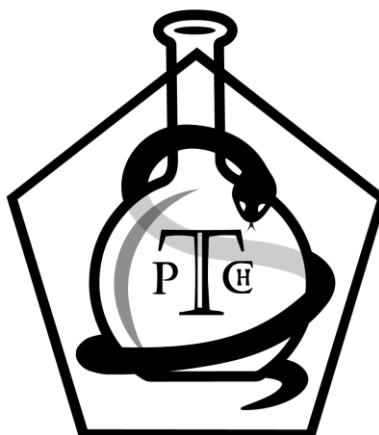


zjazdy.smptchem.pl



#SMPTChem

**ZJAZD WIOSENNY SEKCJI MŁODYCH
POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO
2023**



Europejskie Centrum Edukacji Geologicznej w Chęcinach

03-07 V 2023

MIEJSCE ZJAZDU



Europejskie Centrum Edukacji Geologicznej

SPONSOR PLATYNOWY



HYDROLAB
źródło wody w Twoim laboratorium

Hydrolab Sp. z o.o. Sp. k

SPONSOR DIAMENTOWY



shim-pol

Shim-Pol A.M. Borzymowski Sp. J.

synthos

Synthos S.A.

SPONSOR ZŁOTY



ABL&E-JASCO

ABL&E-Jasco Polska Sp. z o. o.

IKA[®]

IKA Poland Sp. z o. o.



**OFICYNA
EDUKACYJNA**
KRZYSZTOF PAZDRO

**. Oficyna Edukacyjna
Krzysztof Pazdro Sp. z o. o.**



**Chemistry
Europe**

European Chemical
Societies Publishing

Stowarzyszenie Chemisty Europe

PWN
Moc wiedzy

Wydawnictwo Naukowe PWN S. A.

PATRONAT HONOROWY



MARSZAŁEK
WOJEWÓDZTWA
ŚWIĘTOKRZYSKIEGO

Marszałek Województwa Świętokrzyskiego Andrzej Bętkowski



**WOJEWODA
ŚWIĘTOKRZYSKI**

Wojewoda Świętokrzyski Zbigniew Koniusz

PATRONAT



**Stowarzyszenie Inżynierów
i Techników Przemysłu
Chemicznego**



**Wydział Farmaceutyczny
Warszawskiego Uniwersytetu
Medycznego**



**Wydział Chemii Uniwersytetu
im. Adama Mickiewicza
w Poznaniu**



**Wydział Farmaceutyczny
Gdańskiego Uniwersytetu
Medycznego**



**Komisja Rozwoju i Promocji Osiągnięć Młodych Naukowców Polskiej
Akademii Nauk Oddział w Lublinie**

PATRONAT



**Instytut Nauk Chemicznych
Uniwersytetu Marii Curie-
Sklodowskiej w Lublinie**



**Instytut Nauk Chemicznych
Uniwersytetu Przyrodniczo-
Humanistycznego w Siedlcach**



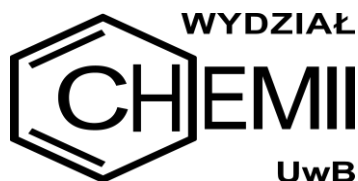
**Wydział Chemii
Uniwersytetu Warszawskiego**



**Wydział Nauk Ścisłych
i Przyrodniczych Uniwersytetu
Jana Kochanowskiego w Kielcach**



**Wydział Chemii
Uniwersytetu Łódzkiego**



**Wydział Chemii
Uniwersytetu w Białymstoku**

PATRONAT



**Wydział Chemii
Uniwersytetu Gdańskiego**



**Wydział Chemiczny
Politechniki Śląskiej**



**Wydział Chemii Uniwersytetu
Jagiellońskiego w Krakowie**



**Wydział Technologii Chemicznej
Politechniki Poznańskiej**



**UNIwersYTET JAGIELLOŃSKI
COLLEGIUM MEDICUM
W KRAKOWIE**



**Wydział
Chemiczny**

POLITECHNIKA WARSZAWSKA

**Wydział Farmaceutyczny
Collegium Medicum Uniwersytetu**

**Wydział Chemiczny
Politechniki Warszawskiej**

PATRONAT

Jagiellońskiego w Krakowie



Wydział
Technologii i Inżynierii
Chemicznej



UMCS
WYDZIAŁ CHEMII

Wydział Technologii i Inżynierii
Chemicznej
Zachodniopomorskiego
Uniwersytetu Przyrodniczego

Wydział Chemii
Uniwersytetu Marii Curie-
Sklodowskiej w Lublinie



Uniwersytet
Wrocławski



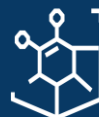
WYDZIAŁ CHEMII
UNIwersYTET OPOLSKI

Wydział Chemii
Uniwersytetu Wrocławskiego

Wydział Chemii
Uniwersytetu Opolskiego



Politechnika Krakowska
Wydział Inżynierii
i Technologii Chemicznej



WYDZIAŁ
CHEMICZNY

Wydział Inżynierii
i Technologii Chemicznej
Politechniki Krakowskiej

Wydział Chemiczny
Politechniki Gdańskiej

PATRONAT MEDIALNY



Radio Kielce

Niniejsze materiały konferencyjne zostały przygotowane na podstawie abstraktów nadesłanych przez aktywnych uczestników Zjazdu Wiosennego SMPTChem.

SMPTChem nie ponosi odpowiedzialności za ich treść.

Redakcja naukowa i przygotowanie materiałów

Sandra Sawicka

Mgr inż. Daria Jaworska-Krych

Projekt logo i grafik

Mgr Tomasz Swebocki

Mgr inż. Jordan Sycz

The title banner features the text "KOMITET NAUKOWY" in a bold, serif font, centered on a light beige background with a dark brown border that has a slightly distressed or hand-painted appearance.

KOMITET NAUKOWY

prof. dr hab. Izabela Nowak – prezes PTChem

(Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu)

prof. dr hab. Zbigniew Galus – prezes Honorowy PTChem

(Uniwersytet Warszawski)

prof. dr hab. Agnieszka Nosal-Wiercińska

(Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej)

prof. dr hab. Artur Michalak

(Uniwersytet Jagielloński)

prof. dr hab. Rafał Latajka

(Politechnika Wroclawska)

prof. dr hab. Jacek Lipok

(Uniwersytet Opolski)

prof. dr hab. Robert Pietrzak

(Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu)

prof. dr hab. Janusz Zachara

(Politechnika Warszawska)

dr hab. Barbara Gawdzik, prof. UJK

(Uniwersytet Jana Kochanowskiego)

dr hab. Dagmara Jacewicz, prof. UG

(Uniwersytet Gdański)

dr hab. Paweł Rodziewicz, prof. UJK

(Uniwersytet Jana Kochanowskiego)

dr hab. Tomasz Pospieszny, prof. UAM

(Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu)

dr Maciej Cieślak

(POLSERVICE)

dr Dawid Frąckowiak

(Centrum Zaawansowanych Technologii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu)

dr Jakub Jończyk

(SANO)

dr Magdalena Zdrowowicz-Żamojć

(Uniwersytet Gdański)

The title banner features the text "KOMITET ORGANIZACYJNY" in a large, bold, serif font, centered on a light beige background with a dark brown border that has a slightly distressed or hand-painted appearance.

KOMITET ORGANIZACYJNY

mgr Tomasz Kostrzewa – przewodniczący SMPTChem

(Gdański Uniwersytet Medyczny)

Katarzyna Szafrąńska – zastępca przewodniczącego SMPTChem

(Collegium Medicum UJ)

mgr Nikola Fajkis-Zajączkowska

(Collegium Medicum UJ)

mgr Aleksandra Skoczeń

(Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu)

mgr inż. Daria Jaworska-Krych

(Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, Politechnika Łódzka)

mgr Tomasz Swebocki

(Institut d'Electronique de Microélectronique et de Nanotechnologie CNRS)

mgr inż. Jordan Sycz

(Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Politechnika Wroclawska)

Alicja Pawlak

(Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie)

Agnieszka Siwiak

(Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu)

Sandra Sawicka

(Politechnika Łódzka)

Konrad Barnowski

(Uniwersytet Jagielloński)



SPIS TREŚCI

Program Zjazdu	17
Koncepcje Badań Naukowych	24
Młodzi Naukowcy	31
Perspektywy Chemika	36
Komunikaty Ustne	41
Komunikaty Posterowe	74
Postery z badań własnych	74
Postery popularno-naukowe	131
Indeks uczestników zjazdu	141

PROGRAM ZJAZDU

DZIEŃ 1 - 03.05

14.00-17.00 **Rejestracja**

17.30-18.00 **Oficjalne Otwarcie Zjazdu Wiosennego 2023**
mgr Tomasz Kostrzewa - Przewodniczący SMPTChem

18.00-18.45 Wykład inauguracyjny „**Koncepcje badań naukowych**”
dr hab. inż. Barbara Gawdzik, prof. UJK
*Związki makro- i heterocykliczne – synteza, modyfikacje strukturalne
i właściwości biologiczne*

19.00-20.00 **Kolacja powitalna**

DZIEŃ 2 – 04.05**8.00-9.30 Śniadanie****9.30-10.15 Koncepcje Badań Naukowych****By Dr hab. Tomasz Pospieszny, prof. UAM***Maria Skłodowska-Curie i odkrycie polonu i radu***Sekcja Chemii Analitycznej i Środowiska****10.30-10.45 Oddziaływania ligandów karbazolowych z I-motywwem DNA o strukturze protoonkogenu BCL-2**

Klaudia Kmiecik

10.45-11.00 Porównanie właściwości miedziowych elektrod jonoselektywnych w zależności od rodzaju i sposobu zastosowania materiału stałego kontaktu

Klaudia Morawska

11.00-11.15 Oddziaływanie tiomocznikowych pochodnych 2-azabicyklo[2.2.1]heptanu z G-kwadruplexem DNA o topologii hybrydowej

Daniel Dec

11.15-11.30 Oddziaływania ligandów z ugrupowaniem triazolowym z tetrapleksem o sekwencji ludzkiego protoonkogenu C-MYC

Jana Brezina

11.30-11.45 Badanie właściwości elektrokinetycznych węgli aktywnych pochodzenia roślinnego – wpływ polimerów jonowych

Marlena Gęca

11.45-12.00 Badanie wybranych właściwości fizykochemicznych kwasu 1,3-tiazyno-4- karboksylowego

Beata Kukuła

12.00-12.30 Przerwa kawowa**12.30-13.00 Perspektywy Chemika****Dr Dawid Frąckowiak CZT/UAM***Express Yourself! — perspektywy rozwoju chemika w zakresie umiejętności twardych i miękkich*

Sekcja Chemii Analitycznej i Środowiska

- 13.15-13.30 **Rozwijanie elektroforetycznej metody oznaczania niskocząsteczkowych związków siarki w ślinie**
Urszula Sudomir
- 13.30-13.45 **Problemy towarzyszące oznaczaniu WWA**
Adrian Olszewski
- 13.45-14.00 **Równoczesna analiza metyloksantyn w napojach energetycznych techniką wysokosprawnej chromatografii cieczowej w układzie faz odwróconych z detekcją diodową UV**
Dominika Kóleczo
- 14.00-14.15 **Przygotowanie próbki superowoców do analizy chromatograficznej**
Marta Gawel
- 14.15-14.30 **Analiza procesu sorpcji metali ciężkich przez hydrożele przyjazne dla środowiska**
Jakub Skubalski
- 14.30-14.45 **Wpływ naturalnego konserwantu z rzodkwi na modelowe błony oraz komórki skóry**
Beata Wyżga
- 14.45-15.00 **Prezentacja Sponsora**
Dr. Inż Miroslaw Danch (Prezentacja firmy ABL&E Jasco Polska Sp. z o.o.)
- 15.00-16.00 **Obiad**
- 16.00-17.30 **Sesja Posterowa I**
- 19.00 **Uroczysta Kolacja**

DZIEŃ 3 – 05.05**8.30-9.30 Śniadanie****12.30-13.00 Wykład z bloku tematycznego „Młodzi naukowcy”****Dr Magdalena Zdrowowicz-Żamojć UG***Modyfikowane nukleozydy jako radiosensybilizatory uszkodzeń DNA***Sekcja Chemii Fizycznej i Teoretycznej****13.15-13.30 Symulacja i analiza dynamiki relaksacji****fotochromicznego furylfulgidu**

Tomasz Gryber

**13.30-13.45 Analysis of Two-Segmented Polyurethane
Physicochemical Properties by Means of Quantum
Chemical Calculations**

Yuliia Didovets

**13.45-14.00 Microsolvation of Diphenylarsinic Acid from First-
Principles Calculations**

Aleksandra Mróz

Sekcja Chemii Polimerów i Przemysłowej**14.00-14.15 Właściwości termiczne wodnych roztworów
modyfikowanego hiperrozgałęzionego poliglicydołu**

Daria Jaworska-Krych

14.15-15.15 Obiad**15.30-16.00 Perspektywy chemika****Dr Maciej Cieślak (POLSERVICE)***Prawo patentowe i ochrona prawna wynalazków z dziedziny chemii,
farmacji i biotechnologii***Sekcja Chemii Medycznej i Leków****16.15-16.30 Intermolecular Interactions in Aqueous Solutions of 2-
aminopyridine**

Masza Góralczyk

Sekcja Chemii Organicznej i Supramolekularnej

- 16.30-16.45 **Synteza mechanochemiczna heterosilsekwioksanów oraz silsekwioksanów klatkowych**
Agata Staszak
- 16.45-17.00 **N-tlenki imidazolu w syntezie związków bioaktywnych**
Wiktor Poper
- 17.00-17.15 **Synteza i badanie właściwości luminescencyjnych 2,3-diarylofuro[2,3-B]chinoksalin oraz 2,3-diarylotieno[2,3-B]chinoksalin**
Patrycja Jagielska
- 17.15-17.30 **Synteza, właściwości termiczne oraz fotofizyczne nowych pochodnych benzo[GHI]peryleneotriimidu**
Angelika Tlałka
- 17.30-19.00 **Sesja Posterowa**
- 19.00-20.00 **Kolacja**

DZIEŃ 4 – 06.05**8.00-9.30 Śniadanie****9.30-10.15 Koncepcje Badań Naukowych****Dr hab. Paweł Rodziewicz, prof. UJK***Woda – wielkie tajemnice małej cząsteczki***Sekcja Chemii Materiałów i Nanotechnologii****10.30-10.45 Badania nad uzyskaniem barwnych warstw tlenkowych w wyniku procesu plazmowego utleniania elektrolitycznego na stopach magnezu**

Daniel Szymura

10.45-11.00 Wpływ środka stabilizującego na syntezę nanocząstek ZnO

Dawid Bernatowicz

11.00-11.15 Niecentrosymetryczne In-MOF-y z fluorowanym linkerem

Agnieszka Siwiak

11.15-11.30 Węgle aktywne otrzymane z pustej osłonki poczwarki muchy hermetia illucens

Dorota Paluch

11.30-11.45 Where Chemistry Meets Microbiology – Deep Eutectic Solvents as a Neoteric Approach for the Treatment of the Bacterial Infections of Wounds

Tomasz Swebocki

11.45-12.15 Przerwa Kawowa**12.15-12.45 Młodzi Naukowcy****Dr Jakub Jończyk***Wykorzystanie technik obliczeniowych w analizie i projektowaniu**białek: Potencjalne zastosowania w medycynie, przemyśle**farmaceutycznym i biotechnologii***13.00-14.00 Optymalizacja procesu syntezy przy wykorzystaniu metod zarządzania projektami**

Nikola Fajkis-Zajączkowska / Alan Zajączkowski

14.00-15.00 Obiad

15.30-17.00 **Ogłoszenie Wyników Konkursu na Najlepsze
Zaprezentowane Postery oraz Najlepszy
Zaprezentowany Komunikat Ustny**

Zarząd SMPTChem

19.00 **Grill**

DZIEŃ 5 – 07.05

8.00-9.30 **Śniadanie**

10.00-11.30 **Wykwaterowanie**



**KONCEPCJE BADAŃ
NAUKOWYCH**

**Dr hab. inż. Barbara Gawdzik**

Instytut Chemii
Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych
Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach

Dr hab. inż. Barbara Gawdzik – w 1988 r. ukończyła studia na Wydziale Chemii Politechniki Krakowskiej, uzyskując tytuł zawodowy magistra inżyniera chemika. Stopień doktora nauk technicznych w dyscyplinie technologia chemiczna uzyskała na Wydziale Chemii Politechniki Krakowskiej. W 2012 r. Rada Wydziału Inżynierii i Technologii Chemicznej Politechniki Krakowskiej nadała jej stopień naukowy doktora habilitowanego w dziedzinie nauk technicznych, dyscyplinie technologia chemiczna specjalność chemia organiczna. Od ukończenia studiów w 1988 r. jest związana z Instytutem Chemii, w którym od 2017 r. jest zatrudniona na stanowisku profesora Uniwersytetu Jana Kochanowskiego w Kielcach, kierując Zakładem Syntezy i Badań Strukturalnych. Tematyka badań skupia się wokół syntezy różnych klas związków organicznych zawierających w swej strukturze układy heterocykliczne i makrocycliczne o potencjalnych właściwościach biologicznych.

ZWIĄZKI MAKRO- I HETEROCYKLICZNE – SYNTEZA, MODYFIKACJE STRUKTURALNE I WŁAŚCIWOŚCI BIOLOGICZNE

Barbara Gawdzik

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Instytut Chemii
b.gawdzik@ujk.edu.pl

Projektowanie strategii syntez nowych związków o określonych właściwościach biologicznych oraz modyfikacje strukturalne znanych bioaktywnych połączeń, to wciąż aktualny temat badań realizowanych w wielu renomowanych ośrodkach badawczych. Związki zawierające w swej strukturze układy heterocykliczne, a zwłaszcza funkcje laktonową zajmują poczesne miejsce wśród połączeń bioaktywnych, z uwagi na szerokie spectrum oddziaływań w stosunku do organizmów żywych. Wielkość pierścienia laktonowego oraz w zasadzie nieograniczone możliwości podstawienia nie tylko γ i δ pierścieni laktonowych, decydują o różnorodności strukturalnej tej grupy związków, a tym samym o właściwościach przeciwbakteryjnych^[1], przeciwwirusowych^[2], przeciwzapalnych^[3], przeciwgrzybiczych^[4], przeciwmalarycznych^[5], czy przeciwnowotworowych^[6], które pozwoliły zastosować pochodne laktonowe jako substancje czynne w farmaceutykach i produktach kosmetycznych. Natomiast aktywność antyfidantna^[7] laktonów, której towarzyszy selektywność działania w stosunku do owadów szkodników stanowi alternatywę dla powszechnie stosowanych insektycydów. Pożądane właściwości sensoryczne pochodnych laktonowych, które znalazły zastosowanie jako komponenty zapachowe i smakowe w przemyśle spożywczym, zadecydowały o opracowaniu metod syntezy zapachowych laktonów na skalę przemysłową.

¹ P. Kowalczyk, B. Gawdzik, D. Trzepizur, M. Szymczak, G. Skiba, S. Raj, K. Kramkowski, R. Lizut, R. Ostaszewski, *Materials*, 2021, 14, 2956-2981.

² B. Iwanwscu, A. Miron, A. Corciova, *J. Anal. Methods Chem.*, 2015, 2015, 247-685.

³ A. Paco, *Molecules*, 2022, 27, 1142.

⁴ C. Wawrzeńczyk, I. Dams, A. Szumny, M. Szczepanik, J. Nawrot, A. Prądyńska, B. Gabryś, K. Danczewicz, E. Magnucka, B. Gawdzik, R. Obara, A. Wzorek, *Pol. J. Environ. Stud.*, 2005, 14, 69-84.

⁵ K. Libiszewska, *Biotechnol. Food Sci.*, 2011, 75, 45.

⁶ A. Kamizela, B. Gawdzik, M. Urbaniak, Ł. Lechowicz, A. Białońska, S. E. Kutniwska, W. Gonciarz, M. Chmiela, *Molecules*, 2019, 24, 1875-1897.

⁷ A. Kamizela, B. Gawdzik, M. Urbaniak, Ł. Lechowicz, A. Białońska, S. E. Kutniwska, W. Gonciarz, M. Chmiela, *Molecules*, 2019, 24, 1875-1897.

**Dr hab. Tomasz Pospieszny, prof. UAM**

Zakład Produktów Bioaktywnych
Wydział Chemii
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Moje zainteresowania naukowe obejmują syntezę, analizę, badania biologiczne i semiempiryczne nowych pochodnych koniugatów steroidowych (kwasów żółciowych oraz sterol) połączonych linkerami łańcuchowymi oraz pierścieniowymi (głównie pierścieniem triazolowym). Poza obszarem chemii produktów naturalnych zajmuję się historią nauki – wpływem kobiet na rozwój nauk ścisłych.

MARIA SKŁODOWSKA-CURIE I ODKRYCIE POLONU I RADU

Tomasz Pospieszny

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Produktów Bioaktywnych
tposp@amu.edu.pl

Odkrycie w 1898 roku przez Marię Skłodowską-Curie i jej męża Piotra Curie polonu oraz radu, doprowadziło do całkowitej rewolucji w świecie fizyki i chemii. Dwa nowe pierwiastki radioaktywne nie tylko zmieniły obraz koncepcji budowy materii, ale także doprowadziły do zmiany w poglądach obejmujących biologię i medycynę^[1]. Z odkrytych przez małżonków Curie pierwiastków rad był tym, który mniej „strzegł” swoich tajemnic. Małżonkowie Curie zapoczątkowali nowy dział chemii – chemię radiacyjną – i nową terapię leczenia nowotworów, która później będzie się nazywać curieterapią. Leczenia dokonywano przez umieszczanie substancji radioaktywnych w specjalnych ampułkach bezpośrednio przy zmianie chorobowej (najczęściej guzie). Po kilku tygodniach takiej formy leczenia guzy ulegały znacznemu zmniejszeniu lub znikaly. Państwo Curie przebadali też promieniowanie emitowane przez rad i polon. Stwierdzili między innymi, że preparaty promieniotwórcze świecą piękną poświatą, sole radu wydzielają samorzutnie ciepło, zaczerniają kliszę fotograficzną, nawet gdy są owinięte w gruby czarny papier, jonizują powietrze, zabarwiają porcelanę i szkło, promieniowanie przechodzi przez powietrze i pewne ciała oraz może przekształcić tlen cząsteczkowy w ozon. Ponadto diament „staje się pod działaniem radu fosforyzujący i w ten sposób daje się łatwo odróżnić od imitacji, które fosforyzują bardzo słabo”^[2]. 14 czerwca 1900 roku na Sorbonie podczas publicznego zebrania Towarzystwa Przyjaciół Nauk Maria Curie powiedziała: „Teoria materyalistyczna promieniotwórcza zdaje dobrze sprawę z zauważonych dotąd zjawisk. Jednakże, jeżeli ją przyjmujemy, musimy uznać, że materya promieniotwórcza nie jest w stanie chemicznym zwykłym. Atom w tym przypadku nie jest niezmienny i niepodzielny, skoro cząsteczki jego są wypromieniowywane. Materya promieniotwórcza ulega przemianie chemicznej, i ta to przemiana jest źródłem energii promieniotwórczości; ale nie jest to przemiana chemiczna zwykła, gdyż tutaj sam atom ulega zmianie. Jest zresztą widoczne, że jeżeli promieniotwórczość wynika z przekształcenia się materii, to przekształcać się tutaj musi sam atom, skoro promieniotwórczość jest zjawiskiem atomowym”^[3].

¹ T. Pospieszny, *Maria Skłodowska-Curie. Zakochana w nauce*, Wydawnictwo Sophia, Warszawa 2022, 119–178.

² T. Pospieszny, *Nowa alchemia czyli historia radioaktywności*, Wydawnictwo Sophia, Warszawa 2022, 96–133.

³ J. Hurwic, *Maria Skłodowska-Curie i promieniotwórczość*, Edukacyjne Żak Zofii Dobkowskiej, Warszawa 2008, s. 57.

**Dr hab. Paweł Rodziewicz, prof. UJK**

Zakład Chemii Fizycznej i Teoretycznej

Instytut Chemii

Uniwersytet im. Jana Kochanowskiego w Kielcach

Paweł Rodziewicz ukończył studia magisterskie na kierunku chemia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego. W trakcie studiów doktoranckich przebywał na stażach naukowych Niemczech, Rosji, Holandii oraz Słowenii. Po obronie pracy doktorskiej wyjechał z Polski i został zatrudniony w Katedrze Chemii Teoretycznej Uniwersytetu Zagłębia Ruhry w Bochum a następnie, od 2008 roku, w Interdyscyplinarnym Centrum Modelowania Zaawansowanych Materiałów oraz Wydziale Chemii i Farmacji na Uniwersytecie Erlangen-Norymberga. W 2011 roku wrócił do Polski jako laureat grantu powrotowego Fundacji na rzecz Nauki Polskiej HOMING PLUS i został zatrudniony na Uniwersytecie w Białymstoku. Od 2018 jest zatrudniony na stanowisku profesora nadzwyczajnego w Instytucie Chemii Uniwersytetu Jana Kochanowskiego w Kielcach.

Obszary jego zainteresowań naukowych skupiają się na badaniu właściwości czasowo-rozdzielczych układów z wewnątrz- i międzycząsteczkowym wiązaniem wodorowym, procesu funkcjonalizacji nanomateriałów węglowych (nanorurki, grafen) oraz solwatacji cząsteczek o specjalnym znaczeniu (bojowe środki trujące, leki) za pomocą metod obliczeniowych chemii kwantowej takich jak: teoria funkcjonału gęstości (DFT) oraz dynamika molekularna ab initio (AIMD). Jest autorem 43 publikacji z listy JCR o sumarycznym IF równym 121.

Kierował lub był wykonawcą 11 międzynarodowych i krajowych projektów badawczych. Aktualnie kieruje projektem OPUS finansowanym przez Narodowe Centrum Nauki dotyczącym zatopionych po II wojnie światowej w Bałtyku bojowych środków trujących. W 2021 roku uzyskał nominację do nagrody „Naukowiec Przyszłości” przyznawanej wyróżniającym się innowatorom przez Forum Inteligentnego Rozwoju oraz został nagrodzony indywidualną nagrodą I stopnia za osiągnięcia naukowe przez JM Rektora Uniwersytetu Jana Kochanowskiego w Kielcach. Wielbiciel wojennych tajemnic Dolnego Śląska oraz prezes zarządu Dolnośląskiego Towarzystwa Historycznego.

WODA – WIELKIE TAJEMNICE MAŁEJ CZĄSTECZKI

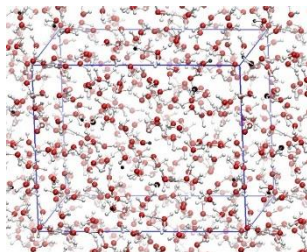
Paweł Rodziewicz

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Instytut Chemii

pawel.rodziewicz@ujk.edu.pl

Oksydan, pod tą nazwą systematyczną Międzynarodowej Unii Chemii Czystej i Stosowanej (z ang. IUPAC), zrozumią dla grona chemików, kryje się tlenek wodoru, powszechnie znany jako woda. Bez wody nie ma życia na Ziemi, dlatego cząsteczka ta była i w dalszym ciągu jest przedmiotem niezliczonych badań naukowych. Woda wywołuje różne skojarzenia w zależności od szerokości geograficznej kraju oraz jego mieszkańców, od zapierającego dech w piersiach wodospadu do wysychającej studni.

Struktura wody oraz wzajemne rozmieszczenie jej cząsteczek w zależności od stanu skupienia różni się, dlatego właściwości agregatu wody o małym rozmiarze nie są tożsame z wodzie w fazie ciekłej. Podczas prezentacji przedstawione zostaną przykłady badań własnych^[1,2,3], które dotyczą wody w różnym stanie skupienia oraz innej temperaturze, ze szczególnym uwzględnieniem opisu właściwości energetycznych, strukturalnych oraz spektroskopowych. Omówione zostaną także właściwości czasowo-rozdzielcze między- oraz wewnątrzcząsteczkowych wiązań wodorowych, których natura jest kluczem do zrozumienia fenomenu wody i jej roli w przyrodzie.



Schemat Struktura wody w fazie ciekłej na podstawie wyników symulacji za pomocą dynamiki molekularnej według Car i Parrinello.

¹ P. Rodziewicz, N. Doltsinis, ChemPhysChem, vol. 8, 2007, pp. 1959-1968.

² P. Rodziewicz, B. Meyer, Phys. Chem. Chem. Phys., vol. 16, 2014, pp. 940-954.

³ T. Klöffel, M. Kozłowska, S. Popiel, B. Meyer, P. Rodziewicz, J. Hazard. Mater., 2021, vol. 402, 2021, pp. 12350.



MŁODZI NAUKOWCY



Dr Jakub Jończyk

Sano – Centrum Zindywidualizowanej Medycyny
Obliczeniowej
Katedra Chemii Farmaceutycznej
Collegium Medicum UJ

Dr Jakub Jończyk uzyskał stopień doktora nauk medycznych i nauk o zdrowiu w dyscyplinie nauki farmaceutyczne na wydziale Farmaceutycznym Collegium Medicum Uniwersytetu Jagiellońskiego. Specjalizuje się w wykorzystaniu technik modelowania molekularnego i uczenia maszynowego. Swoje doświadczenie naukowe wykorzystuje w poszukiwaniu nowych, biologicznie aktywnych związków chemicznych o potencjalnym zastosowaniu w terapii chorób ośrodkowego układu nerwowego.

Aktualnie odbywa szkolenie podoktoranckie w Sano – Centrum Obliczeniowej Medycyny Spersonalizowanej w Krakowie, badawczej organizacji non-profit, która zajmuje się rozwojem medycyny komputerowej. Poszerza tam swoją wiedzę z zakresu technik obliczeniowych i technik uczenia maszynowego. Jego aktualne badania koncentrują się na opracowywaniu nowych podejść do identyfikacji potencjalnych celów biologicznych w chorobie Alzheimera oraz chorobach nowotworowych dzięki użyciu najnowocześniejszych metod obliczeniowych.

WYKORZYSTANIE TECHNIK OBLICZENIOWYCH W ANALIZIE I PROJEKTOWANIU BIAŁEK: POTENCJALNE ZASTOSOWANIA W MEDYCYNIE, PRZEMYSŁE FARMACEUTYCZNYM I BIOTECHNOLOGII

Jakub Jończyk

Uniwersytet Jagielloński Collegium Medicum, Wydział Farmaceutyczny
Sano – Centrum Zindywidualizowanej Medycyny Obliczeniowej – Międzynarodowa Fundacja Badawcza
j.jonczyk@sanoscience.org

Od czasów pierwszej wielkiej współpracy pomiędzy biologią, chemią i naukami komputerowymi w czasie realizacji Human Genome Project nauki te rozwijały się wspólnie w zawrotnym tempie dając początek dziedzinom takim jak bioinformatyka strukturalna czy modelowanie układów biologicznych^[1]. Obecne trendy w tej dziedzinie, w tym adaptacja technik uczenia maszynowego i sztucznej inteligencji, zwiększają zarówno możliwości, jak i wyzwania stojące przed zespołami badawczymi^[2].

Zaprezentowane badania stanowią krótki przegląd aktualnych trendów z dziedziny obliczeniowej biologii strukturalnej i jej zastosowaniach w analizie i projektowaniu białek.

Omówimy rolę tych metod we wspieraniu badań nad lekiem w kontekście medycyny precyzyjnej. Ta rozwijająca się dziedzina ma na celu zapewnienie pacjentom spersonalizowanych opcji leczenia poprzez dostosowanie ich do unikalnego profilu genetycznego. Dzięki przewidywaniu struktur białek i mapowaniu ich interakcji z uwzględnieniem różnic genetycznych modelowanie molekularne odegrało ważną rolę w opracowywaniu spersonalizowanych terapii, takich jak ukierunkowane leczenie przeciwnowotworowe i terapia genowa^[3].

Oprócz zastosowań medycznych techniki komputerowe są szeroko stosowane w inżynierii enzymów i projektowaniu biosensorów. Metody obliczeniowe zapewniają szybki i niedrogi sposób identyfikacji mutacji zwiększających stabilność enzymów lub specyficzność substratów^[4]. Wykorzystując wsparcie modeli predykcyjnych prowadzi się ukierunkowaną mutagenezę pozwalającą otrzymywać białka dostosowane do wymogów procesów biotechnologicznych, takich jak bioremediacja i biokataliza.

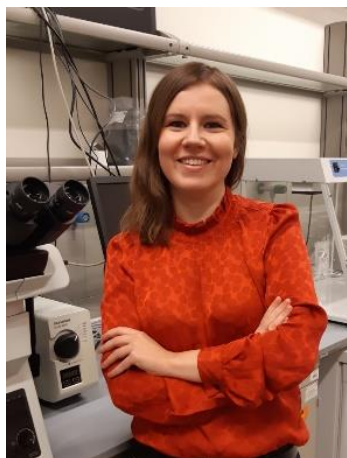
Podziękowania za wsparcie finansowe z programu Unii Europejskiej Horyzont 2020 w ramach umowy grantowej Sano nr 857533 oraz Międzynarodowej Agencji Badawczej Fundacji na rzecz Nauki Polskiej.

¹ C. Chen, H. Huang, C. H. Wu, *Methods Mol. Biol.*, 2017, 1558, 3-39.

² J. Jumper, R. Evans, A. Pritzel, et al, *Nature*, 2021, 596(7873), 583-589.

³ G. Yalcin-Ozkat, *Drug Resist Update*, 2021, 59, 100789.

⁴ J. Song, H. Tan, S. E. Boyd, et al, *J. Bioinform. Comput. Biol.*, 2011, 9(1), 149-178.



Dr Magdalena Zdrowowicz-Żamojć

Wydział Chemii
Uniwersytet Gdański

Od początku kariery akademickiej związana z Wydziałem Chemii Uniwersytetu Gdańskiego, najpierw jako studentka kierunku Chemia biologiczna, później jako słuchaczka Studiów Doktoranckich Chemii i Biochemii, a obecnie jako adiunkt w Katedrze Chemii Fizycznej. W 2018 roku obroniła z wyróżnieniem pracę doktorską pt. „Pochodne zasad nukleinowych jako substancje uwrażliwiające DNA na działanie promieniowania elektromagnetycznego”, realizowaną pod kierunkiem prof. dr hab. Janusza Raka. Główna tematyka badań naukowych dotyczy poszukiwania i charakterystyki nowych foto- i radiosensybilizatorów uszkodzeń DNA z grupy modyfikowanych nukleozydów. W swoich badaniach dr Zdrowowicz-Żamojć wykorzystuje zarówno metody chemiczne, jak i biologiczne, w celu wyjaśnienia mechanizmów ich działania na poziomie molekularnym i komórkowym.

Współautorka 31 publikacji naukowych o łącznym IF=159,4, 2 rozdziałów w książkach naukowych oraz 3 patentów. Kierownik grantu NCN Sonata, NCN Preludium, projektu UGrant-start, a także kilku projektów dla Młodych Naukowców MNiSW. Wykonawca w projektach NCN Maestro, NCN Opus, NCN Sonata, a także w granie międzynarodowym Ceus-Unisono. Dr Zdrowowicz-Żamojć jest również laureatką kilku nagród i programów stypendialnych, m.in. programu Fundacji na rzecz Nauki Polskiej, Start.

MODYFIKOWANE NUKLEOZYDY JAKO RADIOSENSYBILIZATORY USZKODZEŃ DNA

Magdalena Zdrowowicz-Żamojć

Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii
magdalena.zdrowowicz@ug.edu.pl

Radioterapia należy do podstawowych metod leczenia nowotworów. Jednak efekt terapeutyczny promieniowania jonizującego jest redukowany m.in. przez zjawisko hipoksji. Rzeczywiście, w przypadku niedotlenienia, charakterystycznego dla nowotworów litych, ich radiowrażliwość jest 2,5-3 razy niższa niż tkanek o przeciętnym poziomie natlenienia. Warto też podkreślić, że promieniowanie jonizujące nie jest neutralne wobec zdrowych tkanek. Dlatego, aby zwiększyć efektywność i poprawić bezpieczeństwo radioterapii, powinna być ona skojarzona z użyciem radiosensybilizatorów, tj. związków chemicznych, które uwrażliwiają komórki, szczególnie te zmienione nowotworowo, na działanie promieniowania jonizującego. Szczególnie obiecującymi kandydatami na efektywne promieniouczulacze DNA są modyfikowane nukleozydy (MN)^[1]. Modyfikacja strukturalna takich związków polega na wprowadzeniu podstawnika zwiększającego podatność na degradację indukowaną elektronami (*ang.* dissociative electron attachment).

Jednymi z najbardziej obiecujących radiosensybilizatorów z grupy MN są 5-jodo-4-tio-2'-deoksyurydyna^[2] oraz 5-tiocyaniano-2'-deoksyurydyna^[3]. Związki te zostały zaprojektowane w oparciu o badania kwantowo-chemiczne pierwszego, kluczowego etapu indukowanej przyłączeniem elektronu degradacji, prowadzącej do powstania reaktywnego rodnika 5-urydylowego^[4]. Zastosowanie metod chemii radiacyjnej w połączeniu z analizą LC-MS pozwoliło na zbadanie i zaproponowanie mechanizmów indukowanej przyłączeniem elektronu radiodegradacji obiecujących pochodnych. Dalsze badania biologiczne umożliwiły weryfikację właściwości radiouczulających na poziomie komórkowym i wykazały, że badane pochodne istotnie zwiększają wrażliwość wybranych linii komórek nowotworowych na działanie promieniowania jonizującego przy zastosowaniu nawet niskich dawek promieniowania, a mechanizm uwrażliwiania związany jest z generowaniem dwuniciowych pęknięć DNA i indukcją apoptozy^[5].

¹ J. Rak et al., *J. Phys. Chem. B*, 2015, 119(26), 8227-8238.

² S. Makurat et al., *Int. J. Mol. Sci.*, 2019, 20(6): 1308.

³ M. Zdrowowicz et al., *PCCP*, 2015, 17(26), 16907-16916.

⁴ L. Chomicz et al., *J. Phys. Chem. Lett.*, 2013, 4(17), 2853-2857.

⁵ M. Zdrowowicz et al., *Cancers*, 2022, 14(8), 2035.



PERSPEKTYWY CHEMIKA

**Dr Maciej Cieślak**

POLSERVICE Kancelaria Rzeczników Patentowych
ul. Bluszczańska 73,00-712 Warszawa
maciej.Cieslak@polservice.com.pl

Dr Maciej Cieślak prowadzi sprawy związane z ochroną własności przemysłowej w zakresie wynalazków z dziedziny chemii, farmacji i biotechnologii, zarówno w trybie krajowym, regionalnym, jak i międzynarodowym. Przygotowuje się do uzyskania uprawnień polskiego i europejskiego rzecznika patentowego.

Ukończył studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. Studia doktoranckie realizował w Instytucie Chemii Organicznej PAN w Warszawie będąc głównym wykonawcą grantu NCN „Projektowanie i synteza pH- lub redox-czułych dimerycznych dendronów jako nanonarzędzia do transportu siRNA lub leków do komórek glejaka”. Odbił staże naukowe w Instytucie Medycyny Doświadczalnej i Klinicznej PAN oraz w Instytucie Chemii Przemysłowej w Warszawie.

W trakcie studiów doktoranckich był aktywnym członkiem COST Action Nano2Clinic (Cancer Nanomedicine - from the bench to the bedside), grupy skupiającej osoby związane z nanomedycyną i innowacyjnymi terapiami.

Laureat programu mentoringowego TopMinds zrzeszającego naukowców, przedsiębiorców, a także specjalistów z zakresu transferu technologii i komercjalizacji.

Działał w strukturach Polskiego Towarzystwa Chemicznego będąc członkiem zarządu w Sekcji Studenckiej (2 lata jako Wiceprzewodniczący). Był koordynatorem projektu Science Policy oraz polskim delegatem w European Young Chemists' Network (EYCN).

PRAWO PATENTOWE I OCHRONA PRAWNA WYNALEZKÓW Z DZIEDZINY CHEMII, FARMACJI I BIOTECHNOLOGII

Maciej Cieślak

POLSERVICE Kancelaria Rzeczników Patentowych
maciej.cieslak@polservice.com.pl

Ochrona prawna działalności twórczej, naukowej lub badawczo-rozwojowej ma dziś istotne znaczenie, a znajomość podstawowych zagadnień dotyczących praw własności intelektualnej jest niezbędna w wielu sektorach innowacyjnej gospodarki. Podczas wykładu zostaną omówione podstawowe regulacje prawne oraz pojęcia z zakresu prawa własności intelektualnej, a także sposoby i systemy ochrony praw wyłącznych ze szczególnym uwzględnieniem wynalazków. W trakcie spotkania omówione zostaną procedury dotyczące uzyskania patentu na wynalazki z dziedziny chemii, farmacji i biotechnologii. Jeśli podczas realizacji prac badawczych zastanawiałeś/zastanawiałaś się kiedy i w jaki sposób przygotować zgłoszenie patentowe to spotkanie jest dla Ciebie. Wspólnie zastanowimy się jakie wymagania i przesłanki musi spełniać wynalazek, aby mógł zostać opatentowany. W trakcie wykładu porozmawiamy również gdzie szukać profesjonalnej pomocy w sprawach z zakresu własności przemysłowej oraz jaką rolę pełni rzecznik patentowy – profesjonalny pełnomocnik będący specjalistą z zakresu prawa, nauki, techniki oraz biznesu. Spotkanie ma charakter wykładowo - szkoleniowy z możliwością omówienia zagadnień związanych z ochroną własności intelektualnej wskazanych przez Uczestników.

**Dr Dawid Frąckowiak**

Centrum Zaawansowanych Technologii
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

Adiunkt w Centrum Zaawansowanych Technologii UAM w Poznaniu. Kierownik i wykonawca w grantach NCN, NCBiR oraz ID-UB. Uczestnik certyfikowanych szkoleń z zakresu wystąpień publicznych, popularyzacji nauk, promocji badań naukowych oraz komunikacji naukowej. Mówca TEDx PUMS 2021. Chemik-pasjonat, popularyzator nauki oraz zwolennik reformy dydaktyki akademickiej.

EXPRESS YOURSELF! — PERSPEKTYWY ROZWOJU CHEMIKA W ZAKRESIE UMIEJĘTNOŚCI TWARDYCH I MIĘKKICH

Dawid Frąckowiak

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Centrum Zaawansowanych Technologii
dawidoffski@gmail.com

Czasy, w których chemik skupiał się jedynie na wąskim obszarze swoich badań dawno już minęły. Współcześnie, rozwój technologii, social mediów oraz wzrostu społecznej świadomości i potrzeb związanych z promocją badań naukowych, wymógł na naukowcach szereg zupełnie nowych wyzwań.

W swoim wystąpieniu, które chciałbym właściwie potraktować jako formę opisu swojej przygody z nauką oraz jej pobocznymi ścieżkami, podkreślę jak wiele możliwości równoległych ścieżek rozwoju może wybrać obecnie młody chemik.

Opowiem o przebiegu swojej kariery naukowej, opisując pokrótce pozytywne i negatywne zjawiska jakie napotkałem. Wspomnę o tym, jakie umiejętności nabyłem od momentu rozpoczęcia studiów doktoranckich. Co więcej, przedstawię też pokrótce jakich ścieżek indywidualnego rozwoju próbowałem oraz jakie elementy tych ścieżek mogą być najbardziej przydatne młodemu naukowcowi.

Odpowiem też na szereg pytań, które mogą trapić młodego badacza: „jak dobrze mówić o nauce?”, „jak dobrze promować wyniki swoich badań oraz ich znaczenie dla społeczeństwa?”, „jak przetrwać w epoce trudności z finansowaniem nauki?” oraz „jak tworzyć atrakcyjne materiały naukowe i popularnonaukowe?”.

W naszej dzisiejszej rzeczywistości jesteśmy bombardowani niezliczoną liczbą informacji oraz bodźców. Mam nadzieję, że moje wystąpienie pomoże te informacje uporządkować oraz dać kilka użytecznych wskazówek dla młodych adeptów nauk chemicznych.



KOMUNIKATY USTNE



**CHEMIA ANALITYCZNA
I ŚRODOWISKOWA**

ODDZIAŁYWANIA LIGANDÓW Z UGRUPOWANIEM TRIAZOLOWYM Z TETRAPLEKSEM O SEKWENCJI LUDZKIEGO PROTOONKOGENU C-MYC

Jana Brezina¹, Elżbieta Wojaczyńska², Dominika Iwan², Agata Głuszyńska¹

¹ Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Chemii, Zakład Chemii Bioanalitycznej

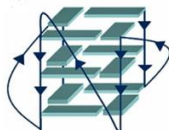
² Politechnika Wroclawska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Fizycznej i Kwantowej

janbre1@st.amu.edu.pl

G-kwadrupeksy (G4) DNA to jedno- lub wieloniciowe struktury DNA utworzone przez sekwencje oligonukleotydowe bogate w guaniny. Ułożone warstwowo G-tetrazy są dodatkowo stabilizowane przez wybrane kationy metali (np. Na⁺, K⁺) i mogą być stabilizowane przez małe ligandy organiczne. G-kwadrupeksy DNA wykazują duży polimorfizm, mogą przyjmować wiele różnych form przestrzennych^[1]. Poszukiwanie ligandów oddziałujących specyficznie z DNA jest bardzo ważne ze względu na potrzeby medycyny, jak i bioanalitiky

Protoonkogeny występują powszechnie w organizmach zwierzęcych. Kodowane przez nie białka uczestniczą w szlakach przekazywania sygnałów i odgrywają kluczową rolę w komórkowych mechanizmach wzrostu, dojrzewania i różnicowania. Niektóre z nich są również zaangażowane w regulację procesów samobójczej śmierci komórkowej (apoptozy). W grupie protoonkogenów najintensywniej badany i najlepiej scharakteryzowany jest gen c-MYC kodujący białko Myc.

Obiektem badań są ligandy z ugrupowaniem triazolowym, dodatkowo zawierające przestrzenny podstawnik 2-azabicyklo[2.2.1] heptan. Oddziaływania ligandów z G-kwadrupeksami ich topologia oraz stabilność badane są przy użyciu spektroskopii dichroizmu kołowego, G4 FID, spektroskopii UV-Vis oraz pomiaru temperatury topnienia. Wstępne badania oddziaływania ligandów z równoległym G4 utworzonym przez sekwencje ludzkiego protoonkogeny C-MYC wykazały, że w grupie badanych ligandów znajdują się pochodne wpływające na strukturę G4.



Rysunek^[2] Topologia równoległa G4 DNA utworzonego na oligonukleotydzie o sekwencji ludzkiego protoonkogeny C-MYC.

¹ T. Ou, Y. Lu, J. Tan, Z. Huang, K. Wong, L. Gu, *Chem. Med.*, 2008, 3, 690-713.

² F. Moraca, J. Amato, F. Ortuso, *PNAS*. 2017, 114, 2136-2145.

ODZIAŁYWANIE TIOMOCZNIKOWYCH POCHODNYCH 2-AZABICYKLO[2.2.1]HEPTANU Z G-KWADRUPLEKSEM DNA O TOPOLOGII HYBRYDOWEJ

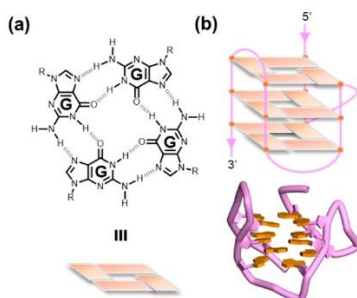
Daniel Dec¹, Elżbieta Wojaczyńska², Dominika Iwan², Agata Głuszyńska¹

¹Uniwersytet Adama Mickiewicza, Zakład Chemii Bioanalitycznej

²Politechnika Wroclawska, Zakład Chemii Fizycznej i Kwantowej

dandec@st.amu.edu.pl

Kwasy nukleinowe bogate w tandemowe powtórzenia guanozyn tworzą specyficzną strukturę tetrad guazynowych, które układają się warstwowo tworząc strukturę drugorzędową DNA zwaną G-kwadrupleksem (G4 DNA). Układy te są stabilizowane wiązaniami wodorowymi typu Hoogsteena w obecności jednowartościowych kationów metali (Na^+ , K^+) i mogą być stabilizowane przez małe ligandy organiczne (Rys.). Najnowsze badania biologiczne wykazują, że G4 DNA mogą być zaangażowane w regulację wielu szlaków biologicznych, takich jak transkrypcja, replikacja, translacja i struktura telomerów^[1].



Rysunek (a) Struktura i schematyczna ilustracja G-tetrazy (b) Struktura hybrydowego G4 DNA^[2].

Metody spektroskopowe takie jak UV-Vis (T_m)^[3], fluorescencja (FID assay)^[4], czy spektroskopia dichroizmu kołowego wykorzystano do badania oddziaływań tiomocznikowych pochodnych 2-azabicyklo[2.2.1]heptanu z G-kwadrupleksem o sekwencji ludzkiego telomerowego DNA. Uzyskane wyniki wskazują, że badane niepłaskie ligandy mają słabe powinowactwo do telomerowego G4 DNA lub możliwe jest inne oddziaływanie niż *end-stacking* z zewnętrznymi G-tetradami.

¹ D. Rhodes, H.J. Lipps, *Nucleic Acids Res.*, 2015, 43(18), 8627-8637.

² S. Asamitsu, S. Obata, S., Z. Yu, T. Bando, H. Sugiyama, *Molecules*, 2019, 24(3), 429.

³ A. I. Karsisiotis, N. Ma'ani Hessari, E. Novellino, G. P. Spada, A. Randazzo, M. Webba da Silva, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2011, 50(45), 10645-10648.

⁴ D. Monchaud, C. Allain, H. Bertrand, N. Smargiasso, F. Rosu, V. Gabelica, A. De Cian, J-L. Mergny, M-P. Teulade-Fichou, *Biochimie*, 2008, 90(8), 1207-1223.

PRZYGOTOWANIE PRÓBKI SUPEROWOCÓW DO ANALIZY CHROMATOGRAFICZNEJ

Marta Gawel^{1,2}, Justyna Piechocka², Rafał Głowacki²

¹Uniwersytet Łódzki, Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych

²Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Środowiska

marta.gawel@edu.uni.lodz.pl

Zagadnienia związane z prawidłowym odżywianiem z roku na rok budzą coraz większe zainteresowanie. Powszechnie wiadomo, że spożywane pokarmy powinny z jednej strony stanowić dla organizmu źródło energii, z drugiej zaś powinny być bogate w składniki odżywcze, niezbędne do jego prawidłowego funkcjonowania. Rezerwuar cennych składników pokarmowych stanowią owoce, wśród których szczególnie ważną grupę stanowią tak zwane *superowoce*, których właściwości prozdrowotne zostały dobrze udokumentowane. Są one bogate m.in. w witaminy, minerały oraz błonnik^[1,2].

W *superowocach* oznaczana jest cała gama różnego rodzaju związków. Obecnie prowadzone badania skupiają się w szczególności na monitorowaniu ich składu pod kątem obecności oraz zawartości substancji określanych mianem przeciwutleniaczy.

Owoce stanowią skomplikowaną matrycę do badań, charakteryzującą się obecnością wielu różnych związków chemicznych. Wspomniana złożoność matrycy pociąga za sobą konieczność poddania próbki wieloetapowemu procesowi jej przygotowania, którego nieodzownymi elementami są homogenizacja tkanek, ekstrakcja oraz filtracja.

Podczas wystąpienia przedstawione zostaną wyniki uzyskane na etapie doboru sposobu przygotowania próbek *superowoców* do analizy za pomocą techniki wysokosprawnej chromatografii cieczowej sprzężonej z detekcją spektrofotometryczną (HPLC-DAD) oraz spektrometrią mas (LC-MS/MS), w celu oznaczenia całkowitej zawartości wybranych niskocząsteczkowych związków siarki.

¹ S.K. Chang, C. Alasalvar, F. Shahidi, *Crit. Rev. Food Sci. Nutr.*, 2019, 59, 1580-1604.

² S. Sau, S. Sarkar, P. Deb, B. Ghosh, *Asian J. Pharm. Clin. Res.*, 2016, 9, 18-22.

BADANIE WŁAŚCIWOŚCI ELEKTROKINETYCZNYCH WĘGLI AKTYWNYCH POCHODZENIA ROŚLINNEGO – WPŁYW POLIMERÓW JONOWYCH

Marlena Gęca¹, Małgorzata Wiśniewska¹, Piotr Nowicki²

¹Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Wydział Chemii, Instytut Nauk Chemicznych, Katedra Radiochemii i Chemii Środowiskowej

²Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej
marlena.geca@mail.umcs.pl

W celu otrzymania węgla aktywnych łądygi melisy oraz mięty pocięto na kawałki o długości 1,5-2,0 cm, a następnie zaimpregnowano z użyciem 50% kwasu fosforowego(V) w stosunku masowym prekursor:czynnik aktywujący 1:2. Po upływie 24 godzin próbki zostały wysuszone w temperaturze 110 °C, a następnie umieszczone w kwarcowych łożeczkach i poddane wieloetapowej obróbce termicznej w laboratoryjnym piecu oporowym. W pierwszym etapie próbki ogrzewano w atmosferze azotu do temperatury 200 °C, a następnie termostatowano przez 30 min. W kolejnym etapie materiał ogrzano do 500 °C (z szybkością 5 °C/min) i ponownie termostatowano przez okres 30 min. Otrzymane materiały węglowe wystudzono w przepływie azotu do temperatury pokojowej, a następnie przemyto 10 l gorącej wody destylowanej i wysuszone do stałej masy. Uzyskane w ten sposób węgle aktywne charakteryzują się bardzo dobrze rozwiniętą powierzchnią aktywną (około 1000 m²/g) i można je sklasyfikować jako adsorbenty mezoporowate.

Właściwości elektrokinetyczne otrzymanych materiałów węglowych określono przy wykorzystaniu miareczkowania potencjometrycznego, które pozwoliło na wyznaczenie gęstości ładunku powierzchniowego oraz dopplerowskiej elektroforezy laserowej, co umożliwiło wyznaczenie potencjału dzeta. Pomiary prowadzono w układach bez adsorbatów, a także w obecności jednego lub dwóch polimerów jonowych jednocześnie (do badań wykorzystano poli(kwas akrylowy) oraz polietylenominę).

Uzyskane wyniki wskazały na kwasowy charakter powierzchni otrzymanych węgla aktywnych. Z uwagi na duży rozmiar cząsteczek, polimery nie adsorbują się płasko na powierzchni adsorbentów, z wytworzeniem wyłącznie struktur typu ciągów. Znaczna część segmentów zaadsorbowanych łańcuchów polimerowych znajduje się w warstwie przypowierzchniowej w strukturach typu pętli i ogonów, a obecne w nich grupy funkcyjne wpływają w dużym stopniu na znak i gęstość ładunku powierzchniowego. W przypadku potencjału dzeta, niezwiązane z powierzchnią fragmenty makrocząsteczek są źródłem dodatnio bądź ujemnie naładowanych grup funkcyjnych, lokujących się w obszarze płaszczyzny poślizgu, determinując wartość tego parametru. Obecne w strukturze poli(kwasu akrylowego) grupy karboksylowe obniżają więc wartość gęstości ładunku powierzchniowego i zarazem potencjału dzeta. Z kolei w przypadku polietylenoiminy, obdarzone ładunkiem dodatnim grupy aminowe powodują wzrost wartości obu tych parametrów.

ODDZIAŁYWANIA LIGANDÓW KARBAZOLOWYCH Z I-MOTYWEM DNA O STRUKTURZE PROTOONKOGENU BCL-2

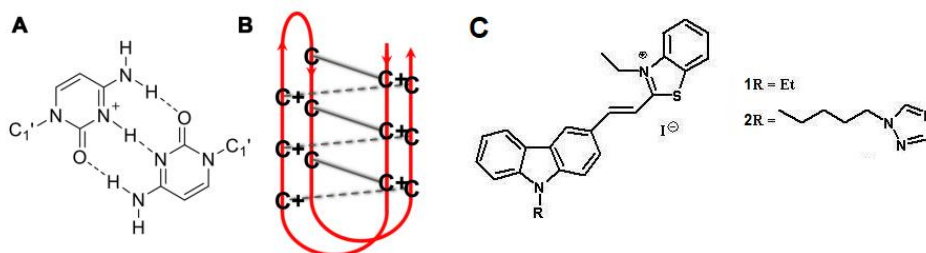
Kludia Kmiecik, Anna Dembska, Agata Głuszyńska

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Bioanalitycznej
klami@st.amu.edu.pl

Sekwencje bogate w cytozynę mogą składać się w struktury zwane i-motywami. W organizmie człowieka struktury te można znaleźć na końcu telomerów, centromerów oraz w pobliżu regionów promotorowych kilku onkogenów^[1]. Struktury i-motywów utrzymywane są dzięki tworzeniu wiązań wodorowych pomiędzy cytozynami i hemiprotonowanymi cytozynami (Rys.)^[2].

Celem pracy było zbadanie oddziaływań dwóch ligandów karbazolowych z i-motywem DNA tworzonym na oligonukleotydzie bogatym w cytozyny, zlokalizowanym w regionie promotorowym onkogenu Bcl-2. Badane ligandy posiadają szkielet karbazolowy sprzężony z grupą benzotiazoliową, a różnią się podstawnikiem na atomie azotu karbazolu (Rys.). Wykazano, że ligandy te stabilizują G-kwadrupleksy DNA tworzące się na oligonukleotydach o sekwencji ludzkiego telomerowego DNA oraz sekwencjach różnych ludzkich protoonkogenów³⁴. Dlatego też postanowiono sprawdzić, czy ligandy te będą oddziaływać z innymi formami strukturalnymi DNA.

Interakcje wybranego i-motywu z dwoma pochodnymi karbazolu zostały zbadane z wykorzystaniem spektroskopii UV-Vis i dichroizmu kołowego.



Rysunek Protonowa para zasad C⁺-C (A) i struktura i-motywu (B).⁵ Struktury ligandów karbazolowych (C).

Badania finansowane z grantu Study@research w ramach Programu Inicjatywa Doskonałości-Uczelnia Badawcza UAM.

¹ H. Abou Assi, M. Garavís, C. González, M. J. Damha, *Nucleic Acids Res.* 2018, 46(16), 8038–8056.

² A. Dembska, *Anal. Chim. Acta*, 2016, 930, 1-12.

³ A. Głuszyńska, B. Juskowiak, M. Kuta-Siejkowska, M. Hoffmann, S. Haider, *Int. J. Biol. Macromol.* 2018, 114, 479-490.

⁴ A. Głuszyńska, B. Juskowiak, B. Rubiś, *Molecules* 2018, 23(12), 3154.

⁵ M. A. Abdelhamid, L. Fábíán, C. J. MacDonald, M. R. Cheesman, A. J. Gates, Z. A. Waller, *Nucleic Acids Res.* 2018, 46(12), 5886–5893.

RÓWNO CZESNA ANALIZA METYLOKSANTYN W NAPOJACH ENERGETYCZNYCH TECHNIKĄ WYSOKOSPRAWNEJ CHROMATOGRAFII CIECZOWEJ W UKŁADZIE FAZ ODWRÓCONYCH Z DETEKcją DIODOWĄ UV

Dominika Kóleczo^{1,2}, Anetta Ziola-Frankowska¹

¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Analitycznej

²Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Naukowe Koło Chemików UAM
dominika.koleczo1@gmail.com

Kofeina (1,3,7-trimetyloksantyna) to związek chemiczny z grupy alkaloidów purynowych występujący w napojach: kawie, herbacie i napojach energetycznych oraz w żywności: czekolada czy kakao. Napoje energetyzujące i kawa rozpuszczalna zawierają najwięcej kofeiny w jednej porcji^[1]. Kofeina może powodować subiektywne wzmocnienie i bodźce, które podobne są do tych wytwarzanych przez kokainę czy amfetaminy przez dopaminę. Alkaloid ten, po spożyciu jest szybko wchłaniany przez organizm i osiąga najwyższe stężenie w osoczu w ciągu 30 minut od spożycia. Nadmierne spożycie kofeiny negatywnie wpływa na zdrowie człowieka, w tym arytmie czy nadciśnienie tętnicze oraz zaburzenia snu. Poziom kofeiny 400 mg lub więcej dla dorosłych i 100-400 mg dla dzieci może powodować niepokój, nudności, drażliwość i zwiększoną nerwowość. Należy pamiętać, że dzieci szybciej metabolizują kofeinę niż dorośli, dlatego są bardziej podatne na zatrucie kofeiną^[2]. Zawartość kofeiny najczęściej podawana przez producentów napojów energetycznych wynosi 32mg/100ml płynu, a sięga nawet 48 mg/100ml. Mimo tak wysokiego stężenia kofeiny oraz innych związków, napoje energetyczne może kupić każdy, nawet kilkuletnie dziecko. Celem badań było opracowanie równoczesnej i szybkiej metody oznaczeń kofeiny, teofiliny i teobrominy w napojach energetycznych przy wykorzystaniu wysokosprawnej chromatografii cieczowej w układzie faz odwróconych oraz porównanie wyników badań do wartości podawanych przez producentów. Opracowana metoda pozwala na przeprowadzenie pełnej analizy w czasie 4 minut. Analizie poddano 56 różnych napojów energetycznych, oznaczając w nich kofeinę, teofilinę i teobrominę. Zaobserwowano różnicę zawartości metyloksantyn w zależności od rodzaju, składu czy ceny napoju energetycznego. Stwierdzono różnice pomiędzy deklarowaną zawartością kofeiny przez producenta, a wartością oznaczoną. Co istotne, oprócz deklarowanej dawki kofeiny, w analizowanych napojach oznaczono również pozostałe metyloksantyny, których stężenie nie zostało podane przez producentów energetyków. To wskazuje na istotny problem, który powinien być uwzględniany w rutynowych badaniach produktów żywnościowych.

*Praca dofinansowana w ramach programu „Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza”
„ADVANCEDBestStudentGRANT”, umowa NR 033/39/ID-UB/0018.*

¹ H.S Mostafa, *Food Sci. Technol*, 2022, 42, 1-7.

² S. Yamaski i in, *Nutrients*, 2023, 15, 1-14.

BADANIE WYBRANYCH WŁAŚCIWOŚCI FIZYKOCHEMICZNYCH KWASU 1,3-TIAZYNO-4-KARBOKSYLOWEGO

Beata Kukuła, Rafał Głowacki, Justyna Piechocka

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Środowiska
beata.kukuła@edu.uni.lodz.pl

Powszechnie wiadomo, że aldehydy ulegają nieenzymatycznej reakcji kondensacji z aminokwasami tiolowymi. Pierwsze informacje w literaturze naukowej dotyczące możliwości powstawania kwasu 1,3-tiazyno-4-karboksykowego (TCA), stanowiącego produkt reakcji homocysteiny (Hcy) lub jej tiolaktonu (HTL) z formaldehydem (FA), w warunkach imitujących fizjologiczne pojawiły się w latach 50-tych ubiegłego wieku^[1]. Pomimo upływu wielu lat, wciąż brakuje podstawowych informacji dotyczących jego właściwości fizykochemicznych. Dotychczas opracowano jedną metodę, wykorzystującą technikę chromatografii gazowej sprzężonej ze spektrometrią mas, której zastosowanie umożliwiło potwierdzenie, że reakcja Hcy / HTL z FA zachodzi w warunkach *in vivo* (w organizmie człowieka), a powstały TCA jest wydalany z organizmu człowieka z moczem^[2]. Rola jaką TCA odgrywa w organizmach żywych pozostaje niewyjaśniona.

Głównym celem badań było dostarczenie informacji na temat wybranych właściwości fizykochemicznych TCA. Cele pośrednie obejmowały określenie: 1) rozpuszczalności TCA w wybranych rozpuszczalnikach wodnych i organicznych, 2) stabilności TCA w różnych warunkach (temperatury, pH) w roztworach wodnych, 3) stałych dysocjacji TCA, 4) zdolności TCA do absorpcji / fluorescencji promieniowania w zakresie światła widzialnego i ultrafioletowego, 5) warunków pracy tandemowego spektrometru mas umożliwiających rejestrację sygnału TCA. Na podstawie wnikliwych badań literaturowych stwierdzono, że dotychczas nie przeprowadzono badań w tym zakresie.

Badania oraz udział w konferencji zostały sfinansowane, między innymi ze środków finansowych pozyskanych przez Beatę Kukuła na realizację projektu zatytułowanego „Badanie wybranych właściwości fizykochemicznych kwasu 1,3-tiazyno-4-karboksykowego” w ramach konkursu Studenckie Granty Badawcze Uniwersytetu Łódzkiego, edycja 2022. Ponadto badania sfinansowano ze środków przyznanych Justynie Piechockiej na realizację zadań badawczych, w ramach konkursu Granty dla młodych badaczy finansowanego w ramach zwiększonej o 2% subwencji dla Uczelni, które przystąpiły do konkursu Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza, zgodnie z umową nr 13/IDUB/MLOD/2021.

¹ J.C. Wriston, C.G. Mackenzie, *J. Biol. Chem.*, 1957, 225, 607–613.

² J. Piechocka, N. Litwicka, R. Głowacki, *Int. J. Mol. Sci.*, 2022, 23, 598.

PORÓWNANIE WŁAŚCIWOŚCI MIEDZIOWYCH ELEKTROD JONOSELEKTYWNYCH W ZALEŻNOŚCI OD RODZAJU I SPOSOBU ZASTOSOWANIA MATERIAŁU STAŁEGO KONTAKTU

Klaudia Morawska, Cecylia Wardak, Karolina Pietrzak

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Wydział Chemii
klaudiamorawska0905@gmail.com

Elektrody jonoselektywne ze stałym kontaktem są przydatnym i często wybieranym narzędziem pomiarowym, dlatego tak ważne jest udoskonalanie ich konstrukcji, aby wyniki uzyskiwane przy ich pomocy były bardziej dokładne, precyzyjne oraz powtarzalne. Jednym z częściej modyfikowanych elementów takich elektrod jest stały kontakt (SC, ang. *solid contact*), ponieważ to dzięki niemu uzyskuje się stabilny i odwracalny potencjał elektrod^[1,2]. Jest to efektem tego, że SC zapewnia dobre przewodnictwo jonowo-elektronowe, a także ułatwia również transport ładunku, co przekłada się na obniżenie oporu membrany oraz zwiększenie pojemności elektrycznej warstwy podwójnej^[3,4]. Stały kontakt wpływa również na właściwości mechaniczne elektrod oraz obniża koszty ich produkcji i ułatwia użytkowanie. Dodatkowo zastosowanie SC daje możliwość miniaturyzacji, co jest kolejną zaletą i wiąże się ze zwiększeniem możliwości aplikacyjnych^[5,6].

W przedstawianej prezentacji omówię wpływ rodzaju stałego kontaktu oraz sposobu jego zastosowania na parametry elektrod jonoselektywnych czułych na jony Cu^{2+} , gdzie stały kontakt stanowił nanokompozyt wielościennych nanorurek węglowych oraz nanocząsteczek tlenku miedzi(II). Badano także elektrody niemodyfikowane oraz elektrody, w których stałym kontaktem były nanocząstki tlenku miedzi(II) i wielościenne nanorurki węglowe. W każdym przypadku SC było zastosowane w dwojaki sposób – jako warstwa pośrednia między membraną jonoselektywną i elektrodą wyprowadzającą oraz jako składnik mieszanki membranowej.

Dla wszystkich przygotowanych elektrod badano takie parametry jak nachylenie charakterystyki, zakres liniowości, granicę wykrywalności, stabilność oraz odwracalność potencjału, wpływ światła i obecności gazów na potencjał oraz wrażliwość na zmiany potencjału redox. Ponadto za pomocą elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej wyznaczono oporność membrany oraz pojemność elektryczną warstwy podwójnej.

¹ E. Zdrachek, E. Bakker, *Anal. Chem.*, 2019, 91, 2-26.

² C. Wardak, K. Morawska, B. Paczosa-Bator, M. Grabarczyk, *Materials*, 2023,16, 1003.

³ J. Bobacka, *Anal. Chem.*, 1999, 71, 4932-4937.

⁴ K. Pietrzak, K. Morawska, S. Malinowski, C. Wardak, *Membranes*, 2022,12, 1150.

⁵ J. Bobacka, A. Ivaska, A. Lewenstam, *Chem. Rev.*, 2008, 108, 329-351.

⁶ T. Han, Z. Mousavi, U. Mattinen, J. Bobacka, *J. Solid State Electrochem.*, 2020, 24, 2975-2983.

PROBLEMY TOWARZYSZĄCE OZNACZANIU WWA

Adrian Olszewski, Grażyna Chwatko

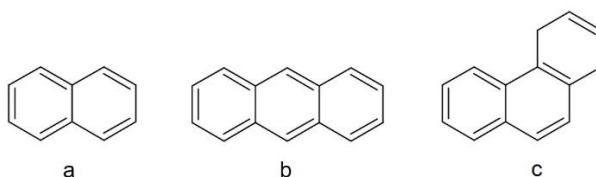
Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Środowiska
ul0231152@edu.uni.lodz.pl

Wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne (WWA, z ang. PAH) są związkami organicznymi, które występują najczęściej w postaci ciał stałych o barwie bladożółtej lub białej^[1]. WWA są związkami zbudowanymi z dwóch lub większej ilości pierścieni benzenu ułożonych w różnej konfiguracji strukturalnej^[2,3].

Do środowiska wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne przedostają się w sposób naturalny na przykład w wyniku niepełnego spalania materiału organicznego (pożary lasów), wybuchów wulkanów^[4]. Intensywny rozwój cywilizacji, a w konsekwencji antropogeniczna emisja WWA, poprzez między innymi emisje z sektora transportu, czy przemysłu^[5] zdominował całkowity udział WWA w atmosferze^[6].

Obecność WWA niezależnie od źródeł pochodzenia niesie za sobą poważne konsekwencje, ponieważ wiele z nich wykazuje właściwości immunotoksyczne zarówno dla ludzi, zwierząt jak i mikroorganizmów^[7].

W ramach prowadzonych badań nad opracowaniem metody oznaczania przedstawicieli policyklicznych węglowodorów aromatycznych (**Schemat**) w ekstraktach z roślin z wykorzystaniem wysokosprawnej chromatografii cieczowej zauważono relację pomiędzy rodzajem rozpuszczalnika stosowanym na etapie przygotowania próbki, a materiałem, w którym są one przechowywane oraz rodzajem membran użytych podczas filtrowania próbki.



Schemat Wzór strukturalny naftalenu (a), antracenu (b) i fenantrenu (c).

Badania sfinansowano ze środków przyznanych na realizację projektu zatytułowanego „Opracowanie metody oznaczania policyklicznych węglowodorów aromatycznych w ekstraktach z roślin z wykorzystaniem wysokosprawnej chromatografii cieczowej”, w ramach Studenckich Grantów Badawczych UŁ w edycji 2023.

¹ R. Singh, A. Yadav, A. Chopra, J. Christopher, G. S. Kapur, *Short Communication*, 2019, 1, 313.

² M. Blumer, W. Blumer, *T. Reich, Environ. Sci. Technol.*, 1977, 11, 1082-1084.

³ A. Masih, J. K. Lal, *IJAER*, 2014, 9(1), 1-7.

⁴ E. Stogiannidis, R. Laane, *Rev. Environ. Contam. Toxicol.*, 2015, 234, 49-13.

⁵ C. E. Boström, P. Gerde, A. Hanberg, B. Jernström, C. Johansson, T. Kyrklund, A. Rannug, M. Törnqvist, K. Victorin, R. Westerholm, *Environ. Health Perspect.*, 2002, 110, 451-488.

⁶ Y. Zhang, S. Tao, *Atmos. Environ.*, 2009, 43(4), 812-819.

⁷ A. L. Bolden, J. R. Rochester, K. Schultz, C. F. Kwiatkowski, *Reprod. Toxicol.*, 2017, 73, 61-74.

ANALIZA PROCESU SORPCJI METALI CIĘŻKICH PRZEZ HYDROŻELE PRZYJAZNE DLA ŚRODOWISKA

Jakub Skubalski¹, Paulina Filipczak²

¹Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Studenckie Koło Naukowe NANO

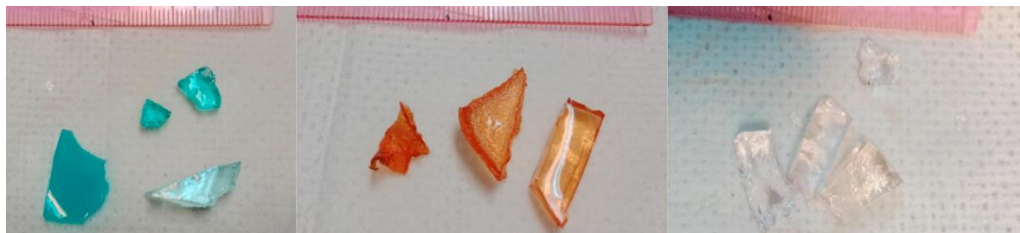
²Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Katedra Fizyki Molekularnej

231325@edu.p.lodz.pl

Około 40% populacji ludzkości (w ponad 80 krajach) zmagają się obecnie z problemem niewystarczających zasobów wody pitnej^[1]. Znaczny odsetek tych zasobów jest ograniczany przez zanieczyszczenie zbiorników wodnych metalami ciężkimi^[2].

Hydrożele polimerowe stanowią bardzo obiecujący wyrób zdolny do wychwytywania wyżej wymienionych zanieczyszczeń. Aby mogły być one powszechnie stosowane do oczyszczania próbek środowiskowych, należy uprzednio zbadać ich charakterystykę sorpcyjną w zależności od czynników zewnętrznych takich jak: pH, twardość wody, stężenie zanieczyszczenia.

Tematem badań było poznanie charakterystyki sorpcyjnej hydrożeli na bazie poli(kwasu akrylowego) będącego polimerem o wysokiej zdolności do chelatowania jonów metali, wzbogaconego celulozą oraz kwasem fitowym, które jako związki pochodzenia naturalnego zwiększają biokompatybilność hydrożelu.



Obraz: hydrożele po pochłonięciu jonów (odpowiednio od lewej) miedzi, żelaza, kobaltu. Wyraźnie widoczna zmiana zabarwienia hydrożelu wywołana obecnością metalu.

Badania finansowane były z projektu pt. „Odzyskiwanie metali ciężkich z wody przy użyciu hydrożeli przyjaznych dla środowiska” realizowanego przez Studenckie Koło Naukowe NANO działające na Wydziale Chemicznym PŁ, w ramach programu „Studenckie koła naukowe tworzą innowacje” finansowanego przez Ministerstwo Edukacji i Nauki (nr rej.: SKN/SP/535469/2022).

¹ B. Galwas, B. Wyżnikiewicz, Czy kryzys światowych zasobów?; Komitet Prognoz „Polska 2000 Plus” przy Prezydium PAN, Warszawa, 2014, 199-211.

² M. Singh Sankhla, M. Kumari, M. Nandan, R. Kumar, and P. Agrawal, *Int. J. Curr. Microbiol. App. Sci.*, 2016, 5(10), 759–766.

ROZWIJANIE ELEKTROFORETYCZNEJ METODY OZNACZANIA NISKOCZĄSTECzkOWYCH ZWIĄZKÓW SIARKI W ŚLINIE

Urszula Sudomir^{1,2}, Paweł Kubalczyk¹, Justyna Piechocka¹

¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Środowiska

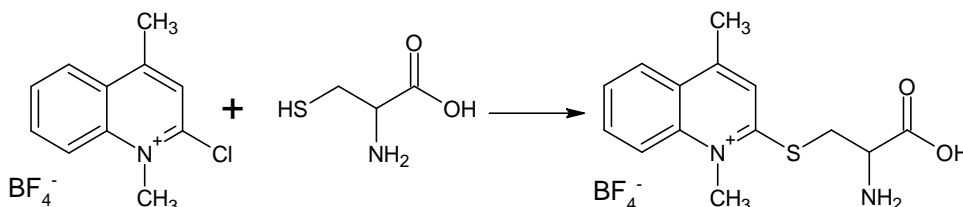
²Studenckie Koło Naukowego Chemików „Orbital” UŁ

urszula.sudomir@gmail.com

Elektroforeza kapilarna (CE) jako jedna z wielu technik separacyjnych jest wykorzystywana do rozdzielania i oznaczania śladowych ilości analitów w próbkach o skomplikowanym składzie matrycy. CE charakteryzuje się wieloma zaletami: wysoką wydajnością rozdzielania, krótkim czasem analizy oraz, co ważne małym zużyciem zarówno odczynników jak i próbek. Niemniej jednak głównym z wymienianych ograniczeń CE w porównaniu do pozostałych technik separacyjnych (takich jak HPLC, GC) jest zdecydowanie gorsza czułość stężeniowa^[1].

Obserwowane jest rosnące zainteresowanie śliną, której wykorzystanie do celów diagnostycznych może stanowić doskonałą alternatywę dla aktualnie stosowanych w diagnostyce chorób płynów biologicznych (krew, mocz). Ślina zawiera bowiem wiele związków, których obecność bądź stężenie może być powiązane z występowaniem czy rozwojem stanów patologicznych w organizmie człowieka. Jednocześnie ogromną zaletą wykorzystania tej matrycy jest łatwość i praktycznie nieinwazyjność związana z jej poborem do badań.

Celem projektu jest stworzenie szybkich i prostych narzędzi umożliwiających ocenę zawartości lepidyniowych pochodnych (**Schemat**) wybranych niskocząsteczkowych związków siarki w próbkach śliny przy wykorzystaniu techniki CE UV-Vis (DAD). W trakcie wystąpienia zostaną omówione wyniki uzyskane podczas optymalizacji etapów przygotowania próbki śliny do analizy oraz warunków elektroforetycznych.



Schemat Reakcja derywatywacji Cys z CMLT.

Badania są sfinansowane ze środków przyznanych Urszuli Sudomir w ramach konkursu Studenckie Granty Badawcze UŁ, edycja VI 2022 oraz VII 2023

¹ B. Buszewski, E. Dziubakiewicz, M. Szumski, (Eds.), *Electromigration Techniques - Theory and Practice*, Springer Series in Chemical Physics 105, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013, ISBN 978-3-642-35042-9.

WPŁYW NATURALNEGO KONSERWANTU Z RZODKWI NA MODELOWE BŁONY ORAZ KOMÓRKI SKÓRY

Beata Wyzga^{1,2}, Kamil Kamiński¹, Katarzyna Hąc-Wydro¹

¹Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Zakład Chemii Środowiska

²Uniwersytet Jagielloński, Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych

beata.wyzga@doctoral.uj.edu.pl

Kosmetyki, wykorzystywane do utrzymywania czystości, pielęgnowania, ochrony lub poprawienia wyglądu skóry towarzyszą ludzkości od wieków. Wzmianki o nich datuje się już na 2500 lat p.n.e.^[1]. Obecnie zainteresowanie produktami kosmetycznymi nieustannie rośnie, a rynek kosmetyczny coraz bardziej się rozwija^[2]. Jednak wymagania konsumentów to już nie tylko zapotrzebowanie na produkty bardziej skuteczne i efektywne, lecz również duże oczekiwania dotyczą bezpieczeństwa stosowanych produktów, zarówno środowiskowego jak i dla samych konsumentów^[2]. Składniki kosmetyków mogą być źródłem różnych efektów niepożądanych^[3]. Szczególnie wiele kontrowersji wzbudzają substancje konserwujące. Uważa się, że to one są przyczyną podrażnień skóry, alergii lub nawet, jak w przypadku parabenów, mogą wpływać negatywnie na układ hormonalny przyczyniając się do powstawania nowotworów^[2,4]. W związku z tym obserwuje się zwiększone zainteresowanie, uznawanymi za bezpieczniejsze, substancjami pochodzenia naturalnego, w tym także ich wykorzystaniem jako konserwanty^[5]. Wiele ekstraktów roślinnych i olejków eterycznych ze względu na swoje przeciwmikrobiologiczne właściwości jest już z powodzeniem stosowane jako substancje konserwujące w produktach np. ekstrakty z owoców i liści melonowca właściwego (*Carica papaya*) znajdując zastosowanie w pomadkach do ust, pudrach do twarzy i dezodorantach^[5].

W przeprowadzonych badaniach określono wpływ komercyjnie dostępnego eko-konserwantu pozyskiwanego z rzodkwi tzn. preparatu Leucidal® Liqid na modele błony komórkowej komórek skóry – fibroblastów i keratynocytów oraz bezpośredni wpływ na wspomniane komórki. Do badań wykorzystano m.in. technikę monowarstw Langmuira oraz wykonano testy na liniach komórkowych.

Badania wykonano przy wsparciu finansowym Wydziału Chemii w ramach Programu Strategicznego Inicjatywa Doskonałości w Uniwersytecie Jagiellońskim.

¹ Khan et al, *JAPSR*, 2019, 2, 1.

² Kerdudo et al., *C. R. Chimie*, 2016, 19, 1077.

³ Lee et al., *Contact Dermatitis*, 2007, 56, 131.

⁴ G. Deza et al., *Curr Opin Allergy Clin Immunol*, 2017, 17, 263.

⁵ K. Nowak et al., *Environmental Research*, 2021, 198, 110488.



**CHEMIA FIZYCZNA
I TEORETYCZNA**

ANALYSIS OF TWO-SEGMENTED POLYURETHANE PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES BY MEANS OF QUANTUM CHEMICAL CALCULATIONS

Yuliia Didovets, Mateusz Z. Brela

Jagiellonian University, Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry and Electrochemistry, Molecular Spectroscopy Group
yuliia.didovets@student.uj.edu.pl

Designing of new polymer materials with desired qualities requires accurate knowledge of the systems' structure-property relations. By changing the structure of monomers some of the polymers' properties can be manipulated. This strategy is often used during the synthesis of polyurethane-based materials.

Polyurethanes' (PUs) main specific feature is their two-segmented structure, composed of soft and hard segments. Soft segments are providing flexibility, while hard segments contribute to polymer's stiffness and mechanical resistance. Polysiloxane-based polyurethanes are particularly beneficial because of their non-cytotoxicity and biocompatibility. Due to their two-segmented structure and wide properties, polyurethanes are perfect candidates for designing shape memory polymers.

The experimental work^[1] describing the synthesis of polysiloxane-based polyurethane showing shape memory properties was chosen as the starting point for theoretical investigation. Molecular dynamics simulations as well as energy decomposition analysis were performed for proposed computational models (Fig.). Obtained results proved the presence of hydrogen bonds between hard segments of PU, partly responsible for the shape memory effect.

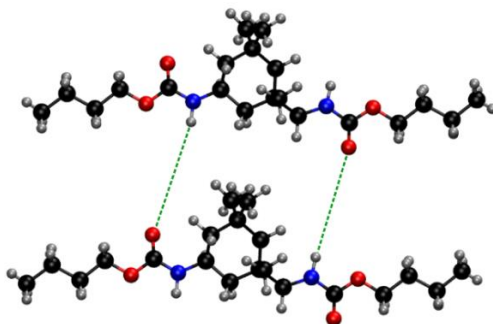


Figure The main computational model of the hard segment; green lines mark suggested hydrogen bonds between polymer chains.

¹ W. Wang, S. Sun, S. Hu, B. Yang, S. He, R. Wang, L. Zhang, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2022, 14(2), 3324–3333.

SYMULACJA I ANALIZA DYNAMIKI RELAKSACJI FOTOCROMICZNEGO FURYLFULGIDU

Michał Andrzej Kochman¹, Tomasz Gryber^{1,2}, Bo Durbeej³, Adam Kubas¹

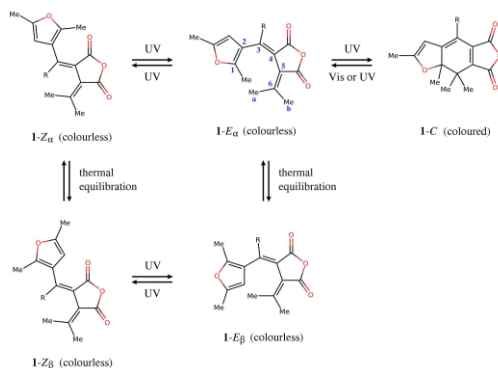
¹Instytut Chemii Fizycznej, Polska Akademia Nauk

²MISMaP, Uniwersytet Warszawski

³Wydział Fizyki, Chemii and Biologii (IFM), Uniwersytet Linköping

t.gryber@student.uw.edu.pl

Furylfulgidy są klasą fotochromicznych związków organicznych, które tworzą złożony system reakcji indukowanych światłem^[2,3]. Modelowano dynamikę stanu wzbudzonego izomerów E_α i E_β dla reprezentatywnego furylfulgidu przy pomocy nieadiabaticznej dynamiki molekularnej. Zastosowano algorytm klasyfikacji do automatycznego rozpoznania wszystkich ścieżek relaksacji i zbadania dystrybucji fotoproduktów. Wyniki symulacji wskazują, że mimo iż oba izomery różnią się jedynie orientacją pierścienia furylowego, wykazują zupełnie inną fotochemię. Główny izomer E_α ulega fotocyklizacji z wydajnością kwantową 0.27 ± 0.10 . Dla tego izomeru, niepożądana fotoizomeryzacja $E \rightarrow Z$ wokół centralnego wiązania podwójnego jest reakcją uboczną, z wydajnością kwantową 0.09 ± 0.07 . Mniejszościowy izomer E_β , który jest niezdolny do fotocyklizacji, ulega fotoizomeryzacji $E \rightarrow Z$ z wydajnością kwantową 0.56 ± 0.14 . Kinetyka relaksacji i dystrybucja fotoproduktów została zinterpretowana w kontekście dostępnych danych eksperymentalnych^[4,5,6,7].



² Y. Yokoyama, *Chem. Rev.*, 2000, 100, 1717 – 1740.

³ F. Renth et al. *Int. Rev. Phys. Chem.*, 2013, 32, 1 – 38.

⁴ R. Siewertsen et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2009, 11, 5952 – 5961.

⁵ M. Handschuh et al., *J. Phys. Chem. A*, 1997, 101, 502 – 506.

⁶ P. J. D'Arcy et al., *J. Chem. Soc., Perkin Trans.*, 1981, 1, 202 – 205.

⁷ Y. Yoshioka et al., *J. Mol. Struct.-THEOCHEM*, 2003, 623, 167 – 178.

MICROSOLVATION OF DIPHENYLARSINIC ACID FROM FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

Aleksandra Kinga Mróz, Paweł Rodziewicz

Jan Kochanowski University of Kielce, Institute of Chemistry
aleksandramroz88@gmail.com

After the First and Second World Wars, huge quantities of produced and unused Chemical Warfare Agents (CWA), such as sulphur mustard (SM, H), adamsite (DM), Clark I (DA), Clark II (DC), Lewisite I (L1), Lewisite II (L2) and arsine oil were dumped in the Baltic Sea. The largest amounts of CWAs dumped in the Baltic Sea concern SM and organoarsenic based CWAs, are estimated to 8000 and 4000 tons, respectively^[1].

The sunken organoarsenic compounds, namely diphenylcyanoarsine (DC) and diphenylchloroarsine (DA), are hazardous chemicals which hydrolytic decomposition leads to the formation of diphenylarsinic acid (DPAA). As DPAA itself is also a dangerous chemical compound, we want to study its physicochemical properties *in silico*, in particular interactions with water molecules.

In our computational study, we postulate a model of solvation of the DPAA molecule in water, therefore we introduce a stepwise procedure based on the addition of water molecules to the DPAA molecule. We focus on the influence of the number of water molecules on structural and energetic properties of the system.

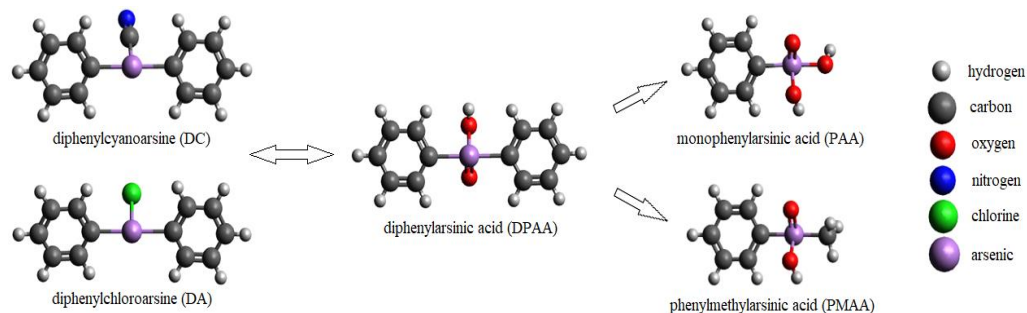


Fig. Decomposition of DC, DA and diphenylarsinic acid (DPAA) biotransformation^[2]

¹ T. Missiaen, M. Söderström, I. Popescu, P. Vanninen, *Sci. Total Environ.*, 2010, 408, 3536–3553.

² K. Ishii, Y. Itoh, N. Iwasaki, Y. Shibata, A. Tamaoka, *Clin. Chim. Acta*, 2014, 431, 227–231.



**CHEMIA MATERIAŁÓW
I NANOTECHNOLOGIA**

WPŁYW ŚRODKA STABILIZUJĄCEGO NA SYNTEZĘ NANOCZĄSTEK ZnO

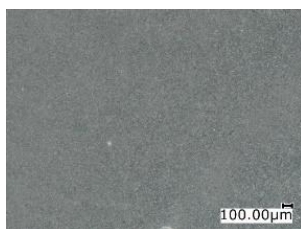
Dawid Bernatowicz, Julita Kostka

Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny
248012@edu.p.lodz.pl

Nanocząstki ZnO są szeroko stosowane w opto- i mikroelektronice do budowy fotodetektorów oraz w transparentnej elektronice do budowy matryc TFT^[1]. Jako, że są one materiałem biokompatybilnym mogą być wykorzystane także w medycynie^[2].

Celem naszych badań było wytworzenie i scharakteryzowanie zawiesin nanocząstek ZnO przy użyciu środka stabilizującego (kwasów karboksylowych) w różnych proporcjach w stosunku do prekursora ZnO. Syntezę przeprowadzono według następującej metody: w etanolu rozpuszczono octan cynku, dodano kwas karboksylowy i ogrzewano do wrzenia, następnie do mieszaniny reakcyjnej wstrzyknięto roztwór wodorotlenku tetrametyloamoniowego, całość ogrzewano przez 2 min, a następnie szybko schłodzono do temp. 0°C. Powstały osad odwirowano, przemyto etanolem i ostatecznie zdyspergowano w toluenie.

Otrzymane cząstki scharakteryzowano pod kątem struktury i morfologii zarówno w postaci zawiesiny jak i cienkiej warstwy wytworzonej metodą osadzania z kropli oraz osadzania na wirujące podłoże. Do badań wykorzystano następujące techniki: spektrofotometrię FT-IR i UV-Vis, a także mikroskop optyczny (**Rys.**) oraz mikroskop sił atomowych.



Zdjęcie mikroskopowe warstwy ZnO otrzymanej metodą osadzania z kropli przy użyciu zawiesiny otrzymanej z octanu cynku i kwasu oleinowego w stosunku molowym 1 do 2.

Dziękujemy pracownikom Katedry Fizyki Molekularnej Politechniki Łódzkiej za pomoc i cenne rady w trakcie realizacji Studenckiego Wolontariatu Naukowego.

¹ A. Galdámez-Martinez, G. Santana, F. Güell, P.R. Martínez-Alanis, A. Dutt, *Nanomaterials*, 2020, 10(5), 857.

² Moussodia, Ralph-Olivier, et al. *Journal of Materials Chemistry* 20.6 (2010): 1147-1155.

WĘGLE AKTYWNE OTRZYMANE Z PUSTEJ OSŁONKI POCZWARKI MUCHY *HERMETIA ILLUCENS*

Dorota Paluch, Aleksandra Bazan-Woźniak, Robert Pietrzak

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej
dorpal1@amu.edu.pl

Mucha *Hermetia illucens*, zwana inaczej czarnym żołnierzem to gatunek owada, którego larwy są wykorzystywane w celach przemysłowych i spożywczych. Owad ten znany jest z krótkiego cyklu rozwojowego, wysokiej odporności na choroby i niskich wymagań dotyczących warunków hodowli. Z tego powodu, hodowla much *Hermetia illucens* rozwija się w coraz szybszym tempie. Larwy muchy są wykorzystywane jako źródło białka w paszach dla zwierząt, szczególnie ryb i drobiu, jak również w karmach dla psów i kotów. Przemysłowa hodowla much *Hermetia illucens* wiąże się z produkowaniem odpadów biologicznych. Odpady składają się przede wszystkim z pancerzyków, które zawierają w swojej strukturze chitynę. Ze względu na swoją naturę, pancerze nie są łatwo przetwarzalne i wymagają specjalnego traktowania^[1]. Dlatego też mogą zostać wykorzystane w produkcji węgla aktywnych.

W związku z powyższym podstawowym celem badań było otrzymanie węgla aktywnych poprzez chemiczną i fizyczną aktywację pustej osłonki poczwarki muchy *Hermetia illucens*. Zbadano właściwości fizykochemiczne (powierzchnia właściwa, skład elementarny, właściwości kwasowo-zasadowe) i sorpcyjne (błękit metylenowy) otrzymanych adsorbentów węglowych. Następnie przeprowadzono testy adsorpcyjne z wykorzystaniem wodnego roztworu błękitu metylenowego. Aby zrozumieć proces adsorpcji barwnika na powierzchni węgla aktywnych przeanalizowano dwa modele izotermiczne: Langmuir, Freundlich. Dodatkowo zbadano wpływ pH roztworu barwnika oraz temperatury procesu na właściwości sorpcyjne otrzymanych adsorbentów. Kinetykę adsorpcji błękitu metylenowego badano, dopasowując dane eksperymentalne do modeli pseudo pierwszego i pseudo drugiego rzędu.

¹ Y. S. Wang, M. Shelomi, *Foods*, 2017, 6(10), 91.

NIECENTROSYMETRYCZNE LN-MOF-Y Z FLUOROWANYM LINKEREM

Agnieszka Siwiak^{1,2}, Dawid Marcinkowski¹, Marcin Runowski^{1,3}, Adam Gorczyński¹

¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii

²Naukowe Koło Chemików Wydziału Chemii UAM

³Uniwersytet w La Lagunie, Wydział Fizyki

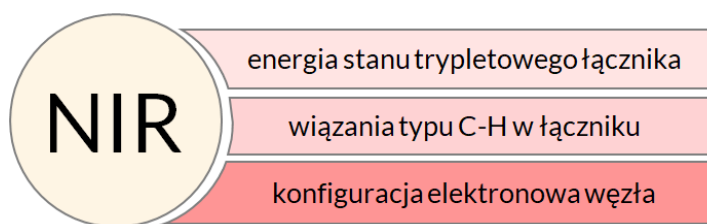
agnsiw1@st.amu.edu.pl

Niecentrosymetryczne sieci metaliczno-organiczne z jonami lantanowców jako węzły (*Ln-MOF-y*) mogą być wykorzystywane jako termometry luminescencyjne. Dzięki brakowi środka symetrii związku te wykazują zjawisko drugiej harmonicznej, zaś obecność jonów lantanowców - dzięki ich szczególnym konfiguracjom elektronowym - fluorescencję. Intensywność obu tych zjawisk jest zależna od temperatury, dlatego ich pomiar umożliwia odczyt temperatury^[1].

Z perspektywy potencjalnych zastosowań biologicznych szczególnie ważne jest, by zarówno wzbudzenie jak emisja następowały w NIR. Wynika to z obecności tzw. okien biologicznych. Uzyskanie efektywnej emisji w NIR wymaga odpowiedniego doboru węzłów oraz linkerów. Linkery powinny cechować wysoka energia stanu trypletowego oraz brak wiązań takich jak C-H, które mogą zachowywać się jak oscylatory^[2],

Aby uniknąć wygaszania luminescencji wysokoenergetyczne wiązania typu C-H mogą być deuterowane bądź fluorowane. Powszechnie wykorzystywany w chemii supramolekularnej kwas 1,3,5-benzenotrikarboksylowy zawiera przy pierścieniu aromatycznym 3 wiązania C-H. Jednak możliwa jest synteza fluorowanych pochodnych tego kwasów i stosowanie otrzymanych produktów w roli linkera w MOF-ach^[3].

W wystąpieniu zostaną omówione postępy nad syntezą nowych Ln-MOF-ów z wykorzystaniem fluorowanych pochodnych kwasu 1,3,5-benzenotrikarboksylowego.



Schemat Czynniki wpływające na efektywną emisję NIR w MOF-ach.

Praca dofinansowana w ramach programu „Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza”
„ADVANCEDBestStudentGRANT” nr 075/39/UAM/0026.

¹ M. Runowski, D. Marcinkowski *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023, 15(2), 3244-3252.

² X. Lian, D. Zhao *et al.*, *ChemComm*, 2015, 51(100), 17676-17679.

³ J. Krautwurst, D. Smets, *et al.*, *Inorg. Chem.*, 2019, 58(13), 8622-8632.

WHERE CHEMISTRY MEETS MICROBIOLOGY – DEEP EUTECTIC SOLVENTS AS A NEOTERIC APPROACH FOR THE TREATMENT OF THE BACTERIAL INFECTIONS OF WOUNDS

Tomasz Swebocki¹, Alexandre Barras¹, Magdalena Plotka², Aleksandra M. Kocot², Elzbieta Jankowska³, Daria Sowik³, Amar Abderrahmani¹, Kamel Haddadi¹, Rabah Boukherroub¹

¹Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, Univ. Polytech. Hauts-de-France, UMR 8520 – IEMN

²Department of Microbiology, Faculty of Biology, University of Gdańsk

³Department of Biomedical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Gdańsk
tomasz.swebocki@univ-lille.fr

Deep Eutectic Solvents (DESs) are a group of neoteric green solvents that have already found their use in many aspects of chemistry, such as (bio)catalysis, electrochemistry and extraction. They owe their versatility due to their tunable properties which can be altered by the selection of parent substances.

In our study, we have focused on the synthesis and microbiological investigation of DESs that comprise various organic acids (OA-DESs). These substances are of particular interest due to their mechanism-of-action towards most of the bacteria. Not only they disrupt locally pH of the bacterial environment but can also inhibit the properties of superficial proteins as well as disrupt the structure of the lipid layers.

Our findings show that most of the investigated DESs exhibit antibacterial properties at concentrations as low as 0.1% v/v and were effective towards, both gram-negative and gram-positive bacteria. They proved also to be a very effective agent for removal of biofilm, which makes them a promising agent for (bio)medical application. What is more, DESs were capable to stabilize antibacterial RAP-29 peptide, reducing its minimal inhibitory concentration almost three times.

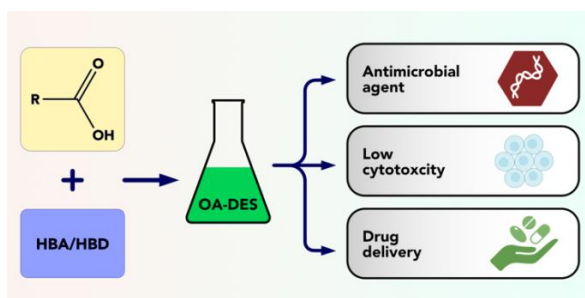


Figure OA-DESs exhibit low cytotoxicity, while also being an effective antibacterial agent.

Doctorate of T.S. is financed by the French Ministry of Higher Education, Research, and Innovation. The CNRS, University of Lille and Hauts-de-France region are also acknowledged for financial support. Partial financing was acquired from National Science Centre (UMO-2020/39/B/NZ6/00589)

BADANIA NAD UZYSKANIEM BARWNYCH WARSTW TLENKOWYCH W WYNIKU PROCESU PLAZMOWEGO UTLENIANIA ELEKTROLITYCZNEGO NA STOPACH MAGNEZU

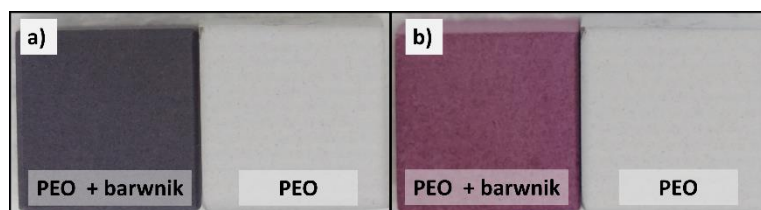
Daniel Szymura, Aleksander Olesiński, Maciej Sowa, Wojciech Simka

Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny
daniszy956@student.polsl.pl

Zastosowanie plazmowego utleniania elektrolitycznego (PEO, *ang.* plasma electrolytic oxidation) na stopach magnezu pozwala otrzymać ochronne, stosunkowo grube i twarde powłoki tlenkowe^[1]. Typowe powłoki PEO są barwy białej lub szarej, co jest jedną z barier w szerokiej komercjalizacji tej metody. Dodatek soli niektórych metali takich jak wanad, molibden czy wolfram do kąpeli elektrolitycznych może zmieniać odcień tych warstw, jednak dostępna paleta barw jest ograniczona, a obecność tych metali wpływa również na inne właściwości powłok (mikrostruktura czy grubość)^[2].

Celem badań było opracowanie prostej metody wytwarzania barwnych powłok w przyjaznym dla środowiska procesie PEO korzystając z barwników organicznych.

Powłoki PEO wytworzono na stopach magnezu AZ91D stosując elektrolity alkaliczne zawierające sole krzemianowe i/lub fosforanowe. Otrzymane próbki z białymi/szarymi warstwami wysuszono i nanoszono barwnik wg autorskiej metody Zespołu Elektrochemii Politechniki Śląskiej. Aby zamknąć barwnik w porach warstwy tlenkowej, przeprowadzono dodatkowy proces PEO. Otrzymane warstwy wykazywały jednorodny, trwały kolor (**Rys.**), nawet po kilku tygodniach od procesu. Ponadto warstwy barwione wykazały zwiększoną odporność korozyjną w porównaniu do warstw pierwotnych (elektrochemiczne badania korozyjne). Charakterystykę powierzchni warstw wykonano pod kątem ich morfologii (mikroskopia elektronowa, profilometria) oraz składu chemicznego (spektroskopia Ramana, rentgenografia strukturalna).



Rysunek Porównanie obrazów makroskopowych próbek stopu magnezu AZ91D po procesie PEO i barwieniu z użyciem a) Solvent black 7 (nigrozyna spirytusowa) i b) Solvent red 122.

Praca finansowana przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w ramach programu LIDER XI (nr projektu: LIDER/30/0116/L-11/19/NCBR/2020; Kierownik: dr inż. Maciej Sowa; wartość dofinansowania: 1 500 000 zł)

¹ T.W. Clyne, S.C. Troughton, *Int. Mater. Rev.*, 2019, 64(3), 127–162.

² J. Pan et al., *Surf. Coat. Technol.*, 2022, 431, 128035.



**CHEMIA MEDYCZNA
I LEKÓW**

INTERMOLECULAR INTERACTIONS IN AQUEOUS SOLUTIONS OF 2-AMINOPYRIDINE

Masza Góralczyk, Paulina Filipczak, Krzysztof Hałagan, Marcin Kozanecki

Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Katedra Fizyki Molekularnej
242177@edu.p.lodz.pl

Most bioactive substances, including drugs, exhibit low water solubility. This poses a problem for humans related with the bioavailability and dosing of such compounds. Sulfonamides is a group of drugs dedicated for treatment of different types of conditions: among others autoimmune diseases and infections. One of the most popular sulfonamides – Sulfasalazine has bioavailability lower than 10%, which results in high doses of 2 g/day^[1] while in comparison, a moderate recommended dose of Ibuprofen stands at 0.8 – 1.2 g/day^[2]. The goal of this research was to analyse intermolecular interactions in aqueous solutions of these drugs.

The substances selected for analysis were compounds being the structural components of Sulfasalazine, one of them being 2-aminopyridine. Aqueous solutions of those compounds at different concentrations were analysed using absorption spectroscopy from the IR and UV-Vis ranges which is particularly useful in such analyses. The FT-IR analysis allowed to observe the differences in vibrational structures of water while the UV-Vis spectrometry was used to note the changes in electronic structures of the compounds themselves.

It was found that for 2-aminopyridine at the concentration of 15 mg/mL, significant shifts of bands in the UV-Vis spectra were observed. The changes were also noted for the IR spectra. Such changes are related with the formation of structures of higher order i.e., dimers and clusters with water that are stabilised by the specific conformation of the amine group and the nitrogen in the aromatic ring^[3,4,5].

Investigations were partially financed within the E²TOP research programme for excellent students at Lodz University of Technology.

¹ G. L. Plosker et al., *Drugs*, 2005, 65(13), 1825–1849.

² M. Busson, *JIMR*, 1986, 14(2), 53–62.

³ Marco Pagliai et al., *J. Comput. Chem.*, 2017, 38, 319–335.

⁴ Elena Samoylova et al., *J. Phys. Chem. A*, 2009, 113(29), 8195–8201.

⁵ Jun-Ying Feng et al., *J. Phys. Chem. A*, 2021, 125(34), 7489–7501.



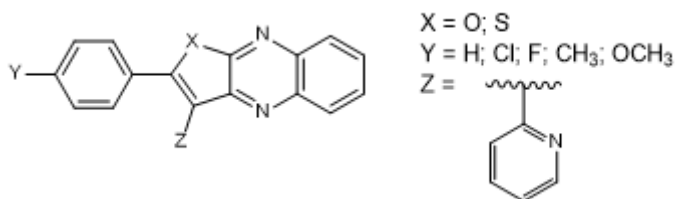
**CHEMIA ORGANICZNA
I SUPRAMOLEKULARNA**

SYNTEZA I BADANIE WŁAŚCIWOŚCI LUMINESCENCYJNYCH 2,3-DIARYLOFURO[2,3-B]CHINOKSALIN ORAZ 2,3-DIARYLOTIENO[2,3-B]CHINOKSALIN

Patrycja Jagielska, Piotr Goszczycki

Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Wydział Chemii
patrycja.jagielska@student.uj.edu.pl

Zjawisko luminescencji oparte jest na emisji światła wywołanej przejściem elektronu ze stanu wzbudzonego do stanu podstawowego czas^[1]. Zjawisko to jest obserwowane dla szerokiej gamy związków organicznych. Szczególnie ciekawe wydają się być tu związki heterocykliczne, których przykładem są pochodne chinoksalin^[2]. Związki te cieszą się w ostatnich latach dużym zainteresowaniem ze względu na ich szeroką stosowalność. Spotkać je można w wielu dziedzinach życia takich jak: rolnictwo^[3], medycyna^[4] czy jako materiały wykorzystywane w elektronice^[5]. Celem przeprowadzonych badań jest synteza związków - pochodnych 2,3-diarylofuro[2,3-b]chinoksalin oraz 2,3-diarylotieno[2,3-b]chinoksalin, a następnie zbadanie ich właściwości luminescencyjnych. Otrzymane związki scharakteryzowano za pomocą spektroskopii ¹H NMR, ¹³C NMR IR oraz wykonano pomiary widm UV-Vis i fluorescencyjnych.



Schemat Struktura syntezowanych pochodnych.

¹ P. W. Atkins, *Chemia fizyczna*; Wydawnictwo PWN, Warszawa, 201, 486-488.

² K. Ostrowska, M. Żylewski, K. Walocho, *Heterocycles*, 2002, 57, 1413-1421.

³ G Sakata, K. Makino, Y. Kurasawa, *Heterocycles*, 1988, 27, 2481–2515.

⁴ S. A. Khan, P. Mullick, S. Pandit, D. Kaushik, *Acta Pol. Pharm.*, 2009, 66, 169–172

⁵ Ł. Starzak, S. Bek, *Mikroelektronika i Informatyka: prace naukowe*, 2007, 7, 117-121.

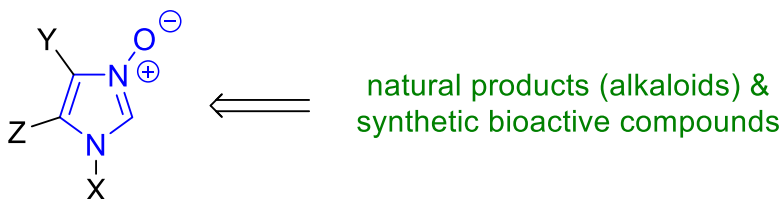
N-TLENKI IMIDAZOLU W SYNTEZIE ZWIĄZKÓW BIOAKTYWNYCH

Wiktor K. Poper, Marcin Jasiński

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej i Stosowanej,
wiktor.poper@edu.uni.lodz.pl

Imidazol stanowi kluczowy element strukturalny licznych związków bioaktywnych, zarówno biogennych (np. histydyna, histamina), jak i syntetycznych (np. klotrimazol, dakarbazyna) o dużym znaczeniu praktycznym. Z tego powodu, opracowanie nowych metod funkcjonalizacji wspomnianego heterocykła do zastosowań w syntezie totalnej stanowi atrakcyjne wyzwanie nowoczesnej syntezy organicznej^[1]. Nie mniej istotny jest dobór odpowiednich syntonów umożliwiających dogodny (szybki, wydajny, etc.) dostęp do produktów o pożądanym właściwościach.

W tym kontekście, niezwykle użyteczną, ale wciąż mało rozpoznaną grupą związków wyjściowych, są 2-niepodstawione N-tlenki imidazolu, których ogólną strukturę przedstawiono na rysunku poniżej^[2]. W komunikacie zaprezentowane zostaną wybrane zastosowania tytułowych związków jako kluczowych bloków budulcowych do syntezy wybranych bioaktywnych pochodnych imidazolu.



Rysunek Wzór ogólny 2-niepodstawionych N-tlenków imidazolu.

Uprzejmie dziękuję Uniwersytetowi Łódzkiemu za finansowanie (IDUB grant NR 5/ODW/DGB/2022).

¹ (a) L. De Luca, *Curr. Med. Chem.*, 2006, 13, 1. (b) L. Zhang, X.-M. Peng, G. L. V. Damu, R.-X. Geng, C.-H. Zhou, *Med. Res. Rev.*, 2014, 34, 223.

² G. Młostoń, M. Jasiński, A. Wróblewska, H. Heimgartner, *Curr. Org. Chem.*, 2016, 20, 1359.

SYNTEZA MECHANOCHEMICZNA HETEROSILSESKWIOKSANÓW ORAZ SILSESKWIOKSANÓW KLATKOWYCH

¹Agata Staszak, ²Dawid Frąckowiak

¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii

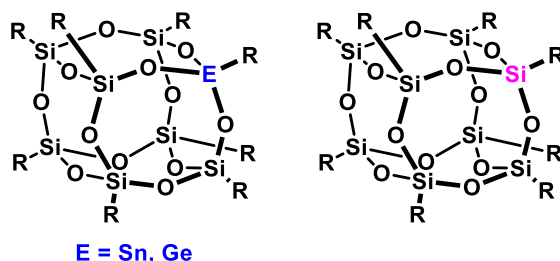
²Centrum Zaawansowanych Technologii UAM, Laboratorium Syntezy Materiałów Specjalnego Przeznaczenia

agata.sta4@gmail.com

Poliedryczne Oligomeryczne Silseskwioksany (POSS®) zbudowane są z nieorganicznego rdzenia Si–O–Si, w którym atomy krzemu posiadają podstawniki organiczne lub nieorganiczne. Związki te cechuje ogólny wzór sumaryczny $(\text{RSiO}_{3/2})_n$. Najdokładniej zbadaną grupą POSS® są pochodne, w których $n = 8$, tzw. silseskwioksany kubiczne^[1].

Odrębną podklasą silseskwioksanów są heterosileskwioksany, w których jeden lub więcej atomów krzemu w rdzeniu siloksanowym zastąpiony jest innym heteroatomem (np. Ge, Sn)^[2]. Heterosileskwioksany oraz silseskwioksany uzyskuje się najczęściej na drodze reakcji kondensacji niekompletnie skondensowanych silanoli lub silanolanów POSS® z odpowiednimi halogeno- i alkoksypochodnymi wybranych heteroatomów. Preparatyka według tej strategii wiąże się jednak z wykorzystaniem rozpuszczalników, a niekiedy również skomplikowanymi procedurami oczyszczania i izolacji.

Na prezentacji zostaną omówione wyniki badań nad mechanochemiczną syntezą kondensacji niekompletnie skondensowanych silanoli oraz silanolanów z Ge, Sn oraz Si, z wykorzystaniem alkoholów oraz halogenopochodnych wspomnianych pierwiastków. Synteza w ciele stałym może zaoferować bezrozpuszczalnikowe warunki prowadzenia reakcji, nowoczesne podejście syntetyczne do nieznanych wcześniej struktur oraz wysoką ekonomią atomową procesów.



Rys.1. Przedstawienie heterosileskwioksanu oraz silseskwioksanu kubicznego.

¹ D. B. Cordes, P.D. Lickiss, F. Rataboul, *Chem. Review.*, 2010, 110, 4, 2081–2173.

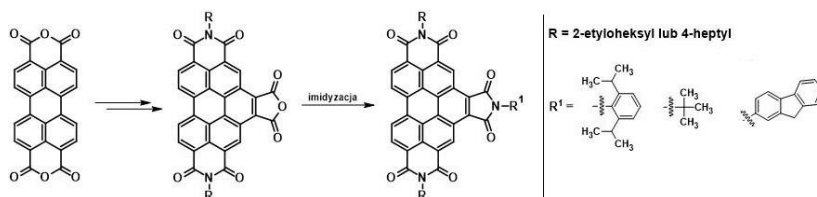
² V. Lorenz, F. T. Edelman in *Metallasilsesquioxanes*, [w:] *Advances in Organometallic Chemistry*, R. West, A. F. Hill, F. G. A. Stone (ed.); Elsevier: 2005.

SYNTEZA, WŁAŚCIWOŚCI TERMICZNE ORAZ FOTOFIZYCZNE NOWYCH POCHODNYCH BENZO[GHI]PERYLENOTRIIMIDU

Angelika Tlałka, Marek Matussek

Uniwersytet Śląski, Instytut Chemii
atlalka1@interia.pl

Stanowiące myśl przewodnią niniejszych badań benzo[ghi]perylene-triimid (BPTI) to organiczne materiały molekularne o znacznym zdelokalizowaniu elektronów π , zawierające w strukturze aż trzy jednostki imidowe nadające owemu ugrupowaniu szereg unikalnych właściwości fizyko-chemicznych. BPTI charakteryzują się między innymi wysoką stabilnością fotochemiczną oraz termiczną, absorbują promieniowanie w szerokim zakresie UV-Vis, a także odznaczają się wysoką energią powinowactwa elektronowego oraz relatywnie dobrą mobilnością ładunków ujemnych w ciele stałym, co sprawia, iż rozpatrywana grupa związków jest postrzegana jako klasa stabilnych, organicznych półprzewodników typu $n^{[1]}$. Co istotne, BPTI są najczęściej otrzymywane z perylenodiimidów (PDI) na drodze cykloadycji Dielsa-Aldera bezwodnika maleinowego do wnętrza PDI. W ten sposób w strukturze docelowego materiału pojawia się dodatkowa grupa bezwodnikowa mogąca poprzez reakcję imidyzacji utworzyć pięciocłonowe ugrupowanie imidowe, co umożliwi poszerzenie zakresu modyfikacji strukturalnej, a tym samym efektywniejsze korelowanie relacji struktura a właściwości względem zaplanowanych związków docelowych (w tym poprawę rozpuszczalności, przetwarzalności i cech samo-organizacyjnych układów docelowych).



Schemat Synteza molekularnych materiałów docelowych – pochodnych BPTI

W ramach badań otrzymano cztery nowe materiały molekularne. Budowę chemiczną półproduktów oraz związków docelowych potwierdzono w oparciu o wykonane widma ^1H i ^{13}C NMR. Dla otrzymanych związków docelowych określono właściwości absorpcyjne w roztworze (chlorku metylenu) oraz wyznaczono stabilność termiczną za pomocą analizy termogravimetrycznej oraz temperatury przejść fazowych z wykorzystaniem techniki skaningowej kalorymetrii różnicowej.

Praca została zrealizowana w ramach grantu: „Nowe związki o potencjalnym zastosowaniu w produkcji ogniw fotowoltaicznych”, UŚ.Realizacja:2022-2023 Kierownik projektu: Katarzyna Kowalska-Szojda.

¹ V. Navarro-Perez, et al., *Chem. Commun.*, 2019, 55, 14946-14949.



**CHEMIA POLIMERÓW
I PRZEMYSŁOWA**

WŁAŚCIWOŚCI TERMICZNE WODNYCH ROZTWORÓW MODYFIKOWANEGO HIPERROZGAŁĘZIONEGO POLIGLICYDOLU

Daria Jaworska-Krych, Mateusz Gosecki, Małgorzata Urbaniak, Monika Gosecka

Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk
daria.jaworska-krych@cbmm.lodz.pl

Celowe dostarczanie leków do miejsc chorobowo zmienionych nadal stawia wyzwania współczesnej medycynie. Znaczna część leków aktualnie dostępnych jest hydrofobowa, co powoduje problem w dostarczaniu ich do hydrofilowego środowiska organizmu ludzkiego. W związku ze słabą biodostępnością leków w trakcie terapii stosuje się znacznie podwyższone dawki bądź zaleca się dłuższe podawanie, co może prowadzić do podrażnień, bólu ale także lekooporności.

Idealnym rozwiązaniem takiego problemu byłoby zastosowanie nośnika leku hydrofobowego, który zwiększyłby rozpuszczalność stosowanych medykamentów w wodzie, a co za tym idzie zwiększyłby ich biodostępność. Nasz zespół proponuje zastosowanie hiperrozgałęzionego poliglicydolu (HbPGL) jako systemu transportującego leki hydrofobowe.

HbPGL to związek stosunkowo prosty do zsyntetyzowania^[1], o budowie zbliżonej do dendrytycznej^[2], ale posiadający w swojej strukturze ugrupowania możliwe do dalszej modyfikacji^[3], jest rozpuszczalny w wodzie^[4], a przy tym wykazuje biokompatybilność^[1,3,4]. Wskazane właściwości przedstawiają HbPGL jako interesujący związek do zastosowań biomedycznych.

W wyniku modyfikacji licznych grup monohydroksylowych ugrupowaniami hydrofobowymi otrzymujemy amfifilowe polimery o ciekawych właściwościach termicznych. Otrzymane wyniki analiz różnicowej kalorymetrii skaningowej, badań turbidymetrycznych oraz dynamicznego rozpraszania światła zostaną przedstwiczone w trakcie prezentacji.

¹ M. Gosecki, B. Zgardzinska, M. Gosecka, J. *Phys. Chem. C*, 2016, 120, 18323-18332.

² J. Li, H. Li, X. Yang, P. LOuo, Z. Wu, X. Zhang, *RCS, Adv.*, 2015, 5, 86730.

³ M. Jafari, S. S. Abolmaali, H. Najafi, A. M. Tamaddon, *Int. J. Pharm.*, 2020, 576, 118959.

⁴ Y. Song, Y. Duan, L. Zhou, *J. Colloid Interface, Sci.*, 2018, 529, 139-149.



**KOMUNIKATY POSTEROWE
(BADANIA WŁASNE)**



**CHEMIA ANALITYCZNA
I ŚRODOWISKOWA**

BADANIE PROCESU MIGRACJI NANOCZĄSTEK TLENKU CYNKU Z PRODUKTÓW MEDYCZNYCH TECHNIKĄ SPEKTROMETRII MAS Z PLAZMĄ INDUKCYJNIE SPRZĘŻONĄ PRACUJĄCĄ W TRYBIE POJEDYNCZEJ CZĄSTKI (SP-ICP-MS)

Anna Karpińska, Julita Malejko, Beata Godlewska-Żyłkiewicz

Uniwersytet w Białymstoku, Wydział Chemii
ak78153@student.uwb.edu.pl

W ostatnich latach obserwowany jest intensywny rozwój nanotechnologii w wielu dziedzinach nauki i gospodarki, tj. w medycynie, biologii, przemyśle wytwórczym oraz elektronicznym^[1]. Z powodu gwałtownego rozwoju rynku nanotechnologicznego zauważalnym zjawiskiem jest wzmożona migracja nanomateriałów, w tym nanocząstek metali i tlenków metali, do środowiska co może powodować negatywny wpływ na organizmy żywe.

Nanocząstki tlenku cynku (ZnONPs – ang. *Zinc Oxide Nanoparticles*) plasują się na trzecim miejscu pod względem największego zużycia wśród nanomateriałów zawierających metale^[2]. Z powodu swoich właściwości, m.in. antymikrobiologicznych oraz ochronnych przeciw promieniowaniu UV znajdują zastosowanie przede wszystkim w przemyśle kosmetycznym oraz materiałowym. Jednak ZnONPs wykazują również działanie cytotoksyczne oraz genotoksyczne wobec różnego typu komórek ludzkich^[3], a w wyższych stężeniach mogą powodować zaburzenia wzrostu roślin^[2].

Aby zbadać potencjalną migrację nanocząstek do środowiska naturalnego, naukowcy rozwijają nowoczesne techniki i metody analityczne charakteryzujące się wysoką czułością, selektywnością oraz dokładnością. Jedną z nich jest technika spektrometrii mas z plazmą indukcyjnie sprzężoną pracująca w trybie pojedynczej cząstki (sp ICP-MS – ang. *single particle Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry*), która umożliwia oznaczanie nanocząstek metali jednocześnie z formą jonową danego metalu.

Celem niniejszej pracy jest opracowanie procedury oznaczania nanocząstek tlenku cynku techniką sp ICP-MS oraz optymalizacja warunków procesu ekstrakcji nanocząstek tlenku cynku z produktów medycznych. Proces migracji ZnONPs badano za pomocą: wody, sztucznego potu oraz izopropanolu. Badania przeprowadzono na 3 produktach medycznych: maseczkach ochronnych, usztywniającej taśmie opatrunkowej oraz włókninie stosowanej do produkcji odzieży medycznej. Wyniki badań wykazały obecność ZnONPs w taśmach, a największy stopień uwolnienia badanych nanocząstek zaobserwowano poprzez zastosowanie do ekstrakcji NPs izopropanolu.

¹ S. Rainieri et al., *Qual. Assur. Saf. Crops Foods*, 2014, 6(3), 263-279.

² A. Czyżowska, A. Barbasz, *Int. J. Environ. Res. Public Health*, 2022, 32(4), 885-901.

³ A. Król et al., *Adv. Colloid Interface Sci.*, 2017, 249, 37-52.

ROZKŁAD TETRACYKLINY W PROCESACH INICJOWANYCH ŚWIATŁEM SŁONECZNYM

Agnieszka Kicińska, Klaudia Stando, Sylwia Bajkacz

Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny
akicinska2@gmail.com

Tetracykliny, w tym jej główny przedstawiciel tetracyklina (TC), są powszechnie wykrywane w wodach i ściekach, ponieważ konwencjonalne metody oczyszczania nie są w stanie ich w pełni usunąć^[1]. Fotokataliza to alternatywna metoda oczyszczania ścieków z pozostałości zanieczyszczeń farmaceutycznych. Fotokataliza heterogeniczna charakteryzuje się niskim kosztem procesu, możliwe jest zastosowanie światła słonecznego i regeneracja katalizatora. Aby uzyskać najwyższą wydajność w procesie fotokatalitycznym konieczny jest dobór odpowiedniego katalizatora, szczególnie jego wielkość powierzchni i czas kontaktu z próbką, składu chemicznego i szerokości pasma wzbronionego.

Celem badania było porównanie efektywności usuwania TC z próbek wody z zastosowaniem wybranych katalizatorów heterogenicznych. W badaniach wykorzystano komercyjnie dostępne TiO_2 ($\text{TiO}_2\text{-A}$ oraz $\text{TiO}_2\text{-P25}$), ZnO , ZrO_2 i WO_3 . Próbkę wody z dodatkiem TC przed i po procesie fotokatalitycznym analizowano z zastosowaniem wysokosprawnej chromatografii cieczowej sprzężonej z tandemowym spektrometrem mas (HPLC-MS/MS).

W zależności od rodzaju katalizatora, skuteczność degradacji TC wyniosła od 72 do 100%. Efektywność działania katalizatorów w procesie fotokatalitycznym wzrastała w kolejności $\text{WO}_3 > \text{TiO}_2\text{-A} > \text{ZnO} > \text{TiO}_2\text{-P25}$. ZrO_2 nie wykazał właściwości fotokatalitycznych. W trakcie 120 min fotolizy (próbka naświetlana bez dodatku katalizatora) zdegradowało 71,5% TC z szybkością reakcji $0,010 \text{ min}^{-1}$. Najwyższą efektywność degradacji TC uzyskano stosując $\text{TiO}_2\text{-P25}$, z którego udziałem usunięto 100% TC w 3 min, a stała szybkości reakcji wynosiła $0,357 \text{ min}^{-1}$. Zbliżoną efektywność zaobserwowano dla ZnO , gdzie całkowita degradacja TC nastąpiła po 5 min, z szybkością reakcji $0,233 \text{ min}^{-1}$. Na podstawie otrzymanych wyników można stwierdzić, że fotokataliza jest dobrą metodą oczyszczania ścieków z pozostałości farmaceutycznych, w tym TC.

Autorzy dziękują Politechnice Śląskiej za udzielone wsparcie finansowe w ramach projektu PBL "Waloryzacja odpadów przemysłu spożywczego/browarniczego w kierunku otrzymywania funkcjonalnych materiałów węglowych" 31/010/SDU20/000610.

¹ J. Scaria, K.V. Anupama, P.V. Nidhees, *Sci. Total Environ.*, 2021, 771 (145291), 1-23.

APARATUROWE METODY BADAŃ KONDYCJI SKÓRY PODCZAS BADAŃ *IN VIVO*

Aleksandra Skoczeń, Izabela Nowak

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej

skoczen@amu.edu.pl

Producenci kosmetyków, którzy wprowadzają na rynek nowe formuły kosmetyczne, zobowiązani są do spełnienia wielu warunków formalnych zanim produkt znajdzie się w sprzedaży. Poza szczegółowym przygotowaniem dokumentacji technicznej produktu, procedura zakłada m.in. szczegółową weryfikację poszczególnych składników preparatu oraz jego bezpieczeństwa i stabilności. Niezwykle istotne jest również sprawdzenie skuteczności działania kosmetyku deklarowanej przez producenta. Tego rodzaju badania prowadzone są metodą *in vivo*, czyli jako testy aplikacyjne na skórze człowieka. Prawidłowa ocena skóry – jej rodzaj cery, aktualna kondycja i zmiany pod wpływem preparatu będą warunkować ocenę zgodności działania kosmetyku z zakładanymi. Aby spełnić oczekiwania rynkowe, diagnostyka kosmetyczna poszukuje nieinwazyjnych, skutecznych metod na określenie parametrów poddawanych działaniu kosmetyku.

Metody badań kondycji skóry są użyteczne i szeroko stosowane do badania stanu powłoki wspólnej m.in. w medycynie człowieka np. przypadkach atopowego zapalenia skóry^[1], także w celu oceny skuteczności stosowania leków o działaniu miejscowym^[2] oraz w kontaktowym zapaleniu skóry^[3].

W prezentacji zostaną przedstawione urządzenia diagnostyczne używane podczas testów laboratoryjnych i przy produkcji kosmetyków takiej jak np. pomiar przeznaskórkowej utraty wody (ang. transepidermal water loss – TEWL) czy nawilżenie naskórka (korneometria).

¹ B. Eberlein-König, T. Schäfer, J. Huss-Marp, U. Darsow, M. Möhrensclager, O. Herbert, D. Abeck, U. Krämer, B. H. J. Ring, *Acta Derm. Venereol.*, 2000, 80, 188–191.

² K. Biro, I. Diamant Falk, R. Ochsendorf, R. Kaufmann, B. Andwolf-Henning, *Contact Dermatitis*, 2003, 49, 80–84.

³ H. Laudańska, T. Reduta, D. Szmitkowska, *Annales Academiae Medicae Bialostocensis*, 2003, 48, 124-127.

SEZAMOL – NAJWAŻNIEJSZY SKŁADNIK OLEJU SEZAMOWEGO?

Sylwia Smarzewska¹, **Monika Wypych**¹, Grażyna Chwatko¹, Dariusz Guziejewski¹, Michał Świdorski¹, Łukasz Bogdański², Sylwia Grzondziel², Kamila Koszelska¹

¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii

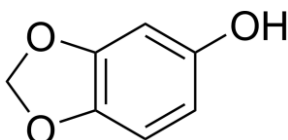
²Miramir Sp. z o.o.

monika.wypych@edu.uni.lodz.pl

Sezam indyjski (*Sesamum indicum* L.) należący do rodziny połapkowatych, to gatunek jednorocznej rośliny oleistej, uznawanej za jedną z najstarszych roślin uprawianych przez człowieka. Jego nasiona charakteryzują się wysoką zawartością tłuszczu, które stanowią aż 50% masy ziarna. Pomimo wysokiej zawartości nienasyconych kwasów tłuszczowych olej sezamowy wykazuje znacznie większą stabilność niż inne oleje roślinne. Tą wyjątkową aktywność antyoksydacyjną oleju sezamowego przypisuje się obecności naturalnych lignanów i tokoferoli. Spośród tokoferoli najobficiej występuje γ -tokoferol. Lignany, wchodzące w skład oleju sezamowego można podzielić na dwie grupy, tj. lignany naturalne w tym sezamolinę i sezaminę, oraz lignany powstające głównie podczas procesu produkcji tj. sezamol i sezamolinol^[1,2].

Za najcenniejszy składnik oleju sezamowego uważa się sezamol (Rysunek) – chemiczną pochodną fenolu, wykazującą właściwości przeciwzapalne, przeciwutleniające, przeciwdepresyjne i neuroprotektoryjne^[1,2]. Zawartość sezamolu w oleju sezamowym jest zmienna – tj. zależna od zastosowanej metody produkcji oleju, a dokładnie od warunków prażenia sezamu. W przypadku olejów wytłaczanych z nasion nieprażonych zawartość sezamolu jest praktycznie niewykrywalna^[1,3].

Niniejsza prezentacja dotyczy wpływu warunków prażenia, tj. czasu prażenia i temperatury prażenia sezamu (łuskanego i niełuskanego) na zawartość sezamolu w olejach sezamowych uzyskanych z zastosowaniem różnych metod produkcji.



Rysunek Wzór strukturalny sezamolu.

¹ J.M. Nzikou (et al.), *Adv. J. Food Sci. Technol.*, 2009, 1 (1), 6-11.

² Y. Wan (et al.) *Society of Chemical Industry*, 2015, 95, 2571-2578.

³ C. Mahendra Kumar (et al.), *J. Food Sci.*, 2009, 74, H105-H111.



**CHEMIA FIZYCZNA
I TEORETYCZNA**

POTENCJAŁ UKRYTY W MAŁEJ GŁÓWCE

Sara Bernat

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Instytut Chemii
sarunia.bernat@wp.pl

Ukryty pod postacią niepozornej małej główki, powszechnie używany podczas przygód kulinarnych, czosnek pospolity to gatunek byliny należący do rodziny amarylkowatych. Jest warzywem, przyprawą i rośliną leczniczą, znaną pod nazwą rodzajową, jako czosnek. Pochodzi z Azji Środkowej, skąd rozprzestrzeniony został jako roślina uprawna na inne kontynenty^[1].

Zainteresowanie czosnkiem oraz korzyściami wynikającymi z jego stosowania, sięga czasów starożytnych. Roślina ta została odnaleziona w egipskich piramidach oraz greckich świątyniach, a słowne odniesienia do niej można odnaleźć w Biblii oraz starożytnych tekstach medycznych pochodzących z Egiptu, Grecji, Rzymu, Chin czy Indii^[2].

Współczesna nauka stara się zbadać właściwości czosnku, znane już od starożytności, starając się określić mechanizmy działania substancji aktywnych zawartych w tej roślinie oraz badać potencjał wykorzystania tych substancji w medycynie^[2].

Za właściwości czosnku odpowiadają zawarte w nim związki zawierające siarkę w swojej strukturze, m.in., tiosulfiny, do których zaliczana jest allicyna^[3]. Substancje aktywne zawarte w czosnku wykazują działanie antybakteryjne, przeciwrzybicze, antyoksydacyjne, przeciwnowotworowe, ale także przeciwwazropowe, czy przeciwmiażdżycowe. Dodatkowo dzięki wzmocnieniu oraz regulacji reakcji komórkowych układu immunologicznego, substancje te zwiększają właściwości obronne organizmu^[4].

W średniowiecznej Europie wierzono, że czosnek chroni przed czarną magią i wampirami. W polskich wsiach czosnek był powszechnie uważany za ziele odpędzające złe duchy i chroniące przed działaniami czarownic^[5]. W mojej prezentacji przedstawię ciekawostki na temat czosnku a także wyniki najnowszych badań na temat jego właściwości prozdrowotnych.

¹ <https://web.archive.org/web/20111208024728/http://sfp.ucdavis.edu/pubs/SFNews/archive/95071.htm>.

² R. S. Rivlin, *J. Nutr.*, 2001, 131, 951S-954S.

³ E. Tattelman, *Am. Fam. Phys.*, 2005, 72, 103-106.

⁴ M. Kwiecień, A. Winiarska-Mieczan, *Probl. Hig. Epidemiol.*, 2005, 92(4), 810-812.

⁵ A. Paluch, *Świat roślin w tradycyjnych praktykach leczniczych wsi polskiej*, WUWr, Wrocław, 1988, 22-23.

MIÓD – ŻŁOTE LEKARSTWO

Adrianna Kajzik

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Instytut Chemii
adrianna.kajzik99@gmail.com

Miód to jeden z najbardziej powszechnych i znanych od tysiącleci produktów naturalnych. Ten słodki, płynny, składnik dodawany do pysznych domowych wypieków ma wiele zastosowań, między innymi jako środek wspomagający leczenie różnych chorób oraz działający pozytywnie na urodę.

Pierwszych informacji o tym niesamowitym wyrobie pszczoł możemy doszukać się w starożytnym Egipcie. Był to produkt przeznaczony wyłącznie dla bardzo bogatych ludzi, czego dowodem było ofiarowanie przez Faraona Ramzesa III aż 15 ton cudownego „płynnego złota” dla boga Nilu. W grobowcach faraonów archeolodzy natrafili na miód, który miał kilka tysięcy lat i nadal nadawał się do spożycia. Jest to jeden z niewielu produktów spożywczych, który nie psuje się. Natomiast w starożytnej Grecji miód miał zapewnić bogom Olimpu nieśmiertelność. Wikingowie zaś stosowali go do konserwacji ryb i owoców. Miód był przez setki lat stosowany do słodzenia wina, pieczywa, ciast, lekarstw oraz wyrobu maści i odgrywał rolę taką jak dziś, powszechnie stosowany, cukier^[1].

W dzisiejszych czasach miód odgrywa istotną rolę w medycynie i kosmetologii. Produkt ten zbudowany jest z naturalnych cukrów, wody oraz składników, takich jak kwasy organiczne (m.in. kwas fenylowy, askorbinowy), proteiny, fenole, aminokwasy, enzymy (m.in. diastaza, inwertaza, oksydaza glikozowa) witaminy oraz pierwiastki niezbędne do prawidłowego funkcjonowania organizmu^[2]. Działa on przeciwutleniająco, przeciwdrobnoustrojowo i przeciwbakteryjnie. Rozróżniamy kilka rodzajów miodu, które zależne są od składu chemicznego i właściwości. Najpopularniejszymi miodami są: gryczany, lipowy, rzepakowy, wrzosowy i akacyjny.^[3] W mojej prezentacji skupię się na krótkiej charakterystyce oraz właściwości prozdrowotnych tych rodzajów miodów.

¹ A. Borecka, *Pol. J. Cosmetol.*, 2019, 22(3): 188-193.

² G. Dubiago, A. Nowak, A. Klimowicz, *Post Fitoter*, 2018, 19(1): 58-64.

³ M. Bąkowska, K. Janda, *Pomeranian J. Life Sci.*, 2018, vol. 64, no. 3, 2018, pp. 147-151.

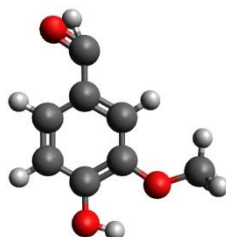
WANILINA- MAGIA AROMATU

Beata Kita

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Instytut Chemii
beata.stando@gmail.com

Każdy z nas uwielbia unoszącą się w domowym zaciszu woń waniliowego sernika. Jest ona spowodowana aromatem waniliowym, który jest mieszaniną wielu związków, jednak charakterystyczny smak i zapach zawdzięcza tylko jednej substancji chemicznej – wanilinie^[1].

Cząsteczka 4-hydroksy-3-metoksybenzaldehydu znana jako Wanilina jest związkiem organicznym, który jest zbudowany z pierścienia aromatycznego oraz trzech grup funkcyjnych: aldehydowej, metoksylovej oraz hydroksylovej.



(Schemat 1) Struktura cząsteczki 4-hydroksy-3-metoksybenzaldehydu (waniliny)

Substancja ta, jest wykorzystywana w przemyśle spożywczym, kosmetycznym i perfumeryjnym, jednak podjęto badania wykazujące jej potencjalne użycie w medycynie ze względu na jej działanie antyrakowe i antyoksydacyjne^[1].

Ze względu na duże zapotrzebowanie waniliny w wyżej wymienionych gałęziach przemysłu oraz wysoką cenę otrzymywania jej ze strąków orchidei *Vanilla planifolia*^[2], opracowano nowe metody pozyskiwania tego aromatu na drodze syntezy chemicznej oraz w procesie biotechnologicznym, jak np. produkcja z kwasu ferulowego^[3]. W swojej pracy pragnę przedstawić najpopularniejsze metody otrzymywania waniliny oraz jej zastosowanie.

¹ S. S. Arya, J. E. Rookes, D. M. Cahill, S. K. Lenka, *Adv. Trad. Med.*, 2021 21:415–431.

² A. R. Brochado, C. Matos, B. L. Møller, J. Hansen, Uffe H. Mortensen, K. Raosaheb Patil, "Brochado et al. *Microbial Cell Factories*" 2010, 9:84.

³ R.J. M. Lubbers, A. I. Dilokpimol, P. A. Nousiainen, R.C. Cioc, J. Visser, Pieter C. A. Bruijninx and Ronald P. de Vries, Lubbers *et al. Microb Cell Fact*" 2021 20:151.

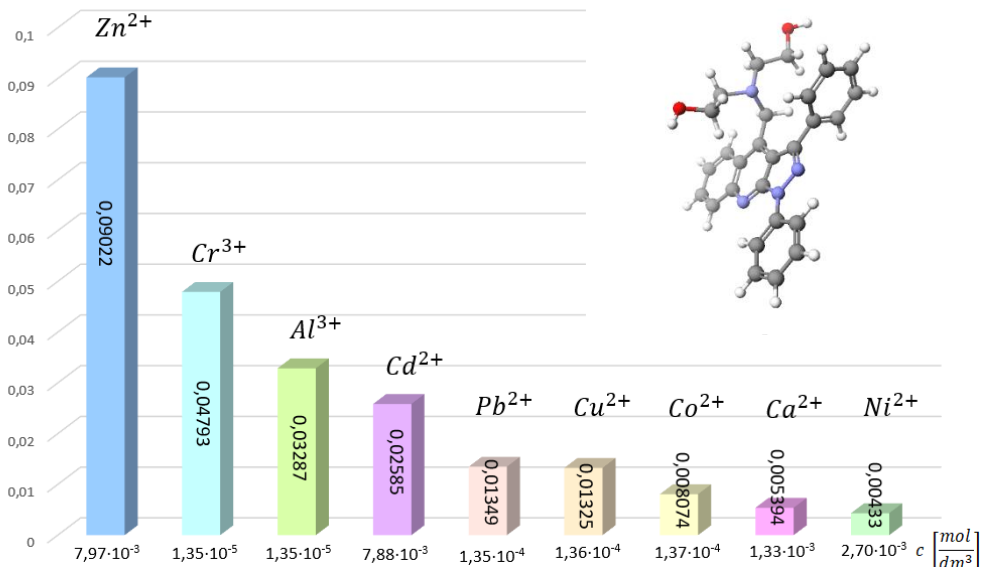
WŁAŚCIWOŚCI SPEKTRALNE POCHODNEJ 1*H*-PIRAZOLO[3,4-*B*]CHINOLINY JAKO CZUJNIKA FLUORESCENCYJNEGO DO WYKRYWANIA WYBRANYCH JONÓW

Paulina Moskwa¹, Anna Kołbus¹, Andrzej Danel²

¹Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych

²Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii Materiałowej i Fizyki
paulinam1999@tlen.pl

Zbadano właściwości spektralne pochodnej 1*H*-pirazolo[3,4-*b*]chinoliny, oznaczanej w skrócie PQ2OH. Cząsteczka PQ2OH posiadała dwie grupy wodorotlenowe i wykazywała niską wydajność kwantową po rozpuszczeniu w kilku wybranych rozpuszczalnikach o różnej polarności. Analizowano odpowiedź fluorescencyjną roztworu PQ2OH w acetonitrylu dla kationów takich jak Zn²⁺, Co²⁺, Ni²⁺, Ca²⁺, Pb²⁺, Al³⁺, Cr³⁺, Cd²⁺, Cu²⁺ (Rys). PQ2OH reagował na niskie stężenia jonów równe 1,35·10⁻⁵ M w obecności jonów trójwartościowych Cr³⁺ i Al³⁺. Największą wydajność kwantową roztworu PQ2OH zaobserwowano po dodaniu jonów Zn²⁺ o stężeniu 7,97·10⁻³ M. Najślabszą odpowiedź fluorescencyjną otrzymano dla jonów Co²⁺, Ca²⁺ i Ni²⁺.



Rysunek Maksymalna wydajność kwantowa roztworów PQ2OH z wybranymi kationami metali. Wartości pod słupkami oznaczają stężenia kationów, dla których zanotowano najwyższą wydajność kwantową.
W rogu - struktura PQ2OH po optymalizacji geometrii.

COMPARISON OF THE STRENGTH OF INTERACTIONS BETWEEN IBUPROFEN AND WATER/ETHANOL MOLECULES FROM FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS

Marta Polańska

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych
marta.opala00@gmail.com

The human's life is associated with many external factors leading to pain. To prevent that, there are different painkillers on the market. One of the most popular medicine in the world is ibuprofen, which belongs to non steroidal anti-inflammatory drugs (NSAID). Ibuprofen is available by prescription or over-the-counter and therefore is commonly used. However, like every overdosed substance (or dosed with inappropriate liquid), it may cause many unpleasant side effects. That is why it is really important for human community to gain knowledge about that compound as much as possible, for instance physicochemical properties.

Ibuprofen, 2-(4-Isobutylphenyl)propanoic acid ($C_{13}O_18O_2$), is a propionic acid derivate, in which one of the hydrogens is substituted by a 4-(2-methylpropyl)phenyl group. It has anti-inflammatory, analgesic and antipyretic effects (¹, ²).

Ibuprofen is soluble in some solvents, including ethanol, however there is no recommendation to take this medication in a combination with ethanol. The aim of this computational study is to calculate binding energies of different molecular complexes between ibuprofen and water/ethanol molecules to check the stability of such systems and compare the energetic effect with respect to the analyzed species.

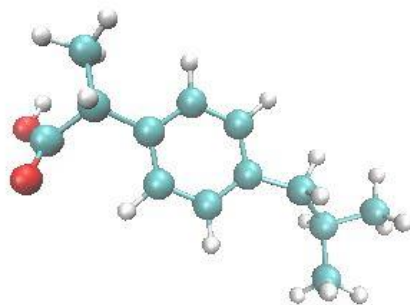


Figure Structure of the 2-(4-Isobutylphenyl)propanoic acid (Ibuprofen) molecule

¹ <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Propionic-acid#section=Refractive-Index>

² M. Zaremba, A. Staniszevska, M. Niewada, *Choroby Serca i Naczyń*, 2012, 9, 119-136.

MODELLING THE SCOPE OF LACCASE FROM *TRAMETES VERSICOLOR*

Bartosz Szymański^{1,2}, Rafał Madaj²

¹Uniwersytet Warszawski, Kolegium Międzywydziałowych Indywidualnych Studiów Matematyczno-Przyrodniczych

²Uniwersytet Warszawski, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych, Instytut Biologii Ewolucyjnej, Laboratorium Bioinformatyki Strukturalnej
bk.szymanski@student.uw.edu.pl

Transformation of methylarenes into aromatic aldehydes is a “Holy Grail” of organic chemistry, due to many plausible applications. Aromatic aldehydes are building blocks in total syntheses of natural products, dyes’ chemistry and in production of therapeutics. Moreover, there are possibility of decomposition of polycyclic aromatic aldehydes using conditions in which methylarenes can be oxidized to formylarenes. However, there are no general method of such procedure, especially for electron-deficient methylarenes. A species of fungi, *Trametes versicolor* can produce laccase, a quite popular enzyme which can oxidize hydroquinones to quinones using copper ions as cofactors. Potthast and co-workers proved in 1995^[1], that laccase can oxidize also methylarenes to formylarenes in the presence of mediator, 2,2'-azino-bis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulfonic acid (ABTS). However, Chaurasia and co-workers have shown in 2013, that for some cases ABTS is not necessary^[2]. In this project we performed molecular docking and molecular dynamics calculations for 14 methylarenes as ligands. 4-methyl-2,1,3-benzothiadiazole binds the best to the laccase (**Fig.**), at least *in silico*. We are going also to investigate reactivity of selected ligands *in vivo*, by setting a culture of *T. versicolor*, isolation of the laccase and perform oxidation of methylarenes.

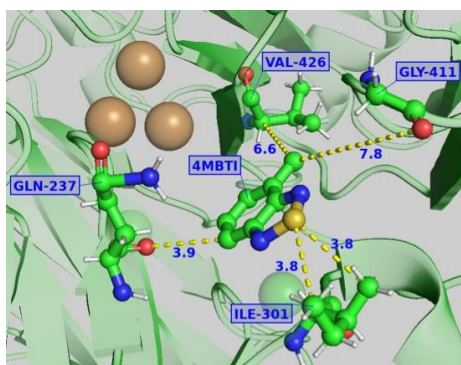


Figure 4-methyl-2,1,3-benzothiadiazole (4MBTI) binded to laccase in its binding site.

This work is support by grant plg-trametes from PLGrid.

¹ A.Potthast et al., *J Org. Chem.*, 1995, 60(14), 4320-4321.

² P.K.Chaurasia et al., *Prikl Biokhim Mikrobiol.*, 2013, 49(6), 592-599.

TEOBROMINA – SEKRET ZAMKNIĘTY W TABLICZCE CZEKOLADY

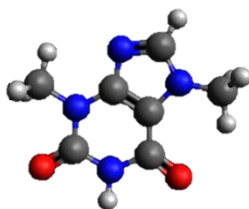
Weronika Śnioch

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Instytut Chemii
veronikasnioch@gmail.com

Celem mojej prezentacji jest przedstawienie pozytywnego potencjału tkwiącego w kostce czekolady, której konsumpcja tak często podlega krytyce dietetyków. Czekolada jest bogata w substancje, które pozytywnie na nas wpływają. Są to m.in.: żelazo, magnez, niacyna i flawonoidy. Ponadto w jej składzie można znaleźć związki chemiczne, które podnoszą poziom serotoniny. Czekolada w swoim bogatym składzie zawiera również teobrominę, którą właściwości chciałabym przedstawić w szerszym zakresie.

Teobromina (Schemat) jest związkiem chemicznym, który należy do grupy alkaloidów purynowych. Swoją, pełną gracji, budowę zawdzięcza dwóm grupom karbonylowym, przyłączonym do pierścienia będącego pochodną puryny. Związek ten występuje w naturze w ziarnach kakao. W jednej tabliczce gorzkiej czekolady może być jej nawet do 1g a w mlecznej do 0.5g^[1]! To właśnie teobromina jest odpowiedzialna za gorzki smak czekolady.

Teobromina przyjęta w pokarmie przez niektóre zwierzęta np. psy, może powodować śmierć. Natomiast u ludzi teobromina oprócz tego, że może przenikać do krwi i stanowić składnik mleka matki^[2], może również wspomagać rozpuszczanie moczanów i kamieni nerkowych^[3]. Niektóre badania potwierdzają, że związek ten jest dobrym kandydatem jako substancja służąca do zwalczania uporczywego kaszlu^[4].



Schemat Struktura cząsteczki teobrominy wykonana w programie Avogadro.

¹ I. Cova; V. Leta; C. Mariani; L. Pantoni; *Psychopharmacology (Berl)*, 2019, 236, 561-572.

² A. Purkiewicz; R. Pietrzak-Fiećko; F. Sörgel; M. Kinzig; *Nutrients*, 2022, 14.

³ F. Julià; A. Costa-Bauza; F. Berga; F. Grases, *World J. Urol.*, 2022, 40, 2105–2111.

⁴ O.S. Usmani; M.G. Belvisi; H.J. Patel; N. Crispino; M.A. Birrell; M. Korbonits; D. Korbonits; P.J. Barnes, *The FASEB Journal*, 2005, 19, 1–16.



**SEKCJA
INTERDYSCYPLINARNA**

FLUORESCENCJA. BARWNIKI FLUORESCENCYJNE

Magda Adamczyk^{1,2}, Radosław Podsiadły², Iwona Masłowska – Lipowicz¹

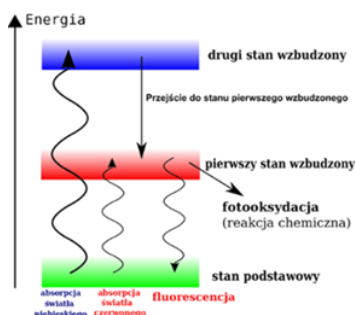
¹Sieć Badawcza Łukasiewicz – ŁIT, Centrum Materiałów Obuwniczych, Produktów Barwionych/Spożywczych

²Politechnika Łódzka, Instytut Technologii Polimerów i Barwników
magda.adamczyk@dokt.p.lodz.pl

W niniejszej pracy omówiono zasadę działania fluorescencji, a także zilustrowano najważniejsze barwniki fluorescencyjne wykorzystywane w przemyśle włókienniczym oraz przedstawiono koncepcję syntezy nowego barwnika fluorescencyjnego.

Zasada działania fluorescencji została przedstawiona na Rysunku. Cząsteczki chlorofilu absorbują światło widzialne o długościach fal odpowiadających barwie niebieskiej i czerwonej. Ta zaabsorbowana przez cząsteczki chlorofilu energia jest głównie wykorzystywana w procesach fotochemicznych, natomiast jej nadmiar ulega wypromieniowaniu w postaci fluorescencji, ciepła lub może być przekazywana do sąsiednich kompleksów barwnikowych^[1].

Zjawisko fluorescencji można zaobserwować w wielu substancjach chemicznych. Do jednych z nich należą barwniki. Barwniki fluorescencyjne są to związki silnie absorbujące i emitujące promieniowanie w obszarze widzialnym, a swój potencjał aplikacyjny zawdzięczają intensywnym właściwościom fluorescencyjnym^[2]. Szeroka gama substancji fluorescencyjnych znalazła zastosowanie w różnych dziedzinach życia i nauki.



Rysunek. Stany wzbudzone chlorofilu pod wpływem światła^[1].

¹ M. Sulkiewicz, I. Cierieszko, *Kosmos problemy nauk biologicznych*, 2016, 1, 103-115.

² R.M. Christie, *Handbook of Textile and Industrial Dyeing*, 2011.

METYLACJA FLAWONOIDÓW Z ZASTOSOWANIEM METYLOTRANSFERAZ AKTYWNYCH WOBEC GRUP FENOLOWYCH PIERŚCIENIA B

Sylwia Kozioł, Agata Matera, Jarosław Popłoński

Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności
sylvia.koz@icloud.com

Związki flawonoidowe to wtórne metabolity tkanek roślinnych, w których pełnią funkcję ochronną przed promieniowaniem UV i stresem oksydacyjnym^[1]. Ich potencjał antyoksydacyjny sprawia, że stanowią ważny element diety. Flawonoidy to grupa związków zróżnicowana pod względem aranżacji pierścieni, ilości oraz rozmieszczenia grup funkcyjnych. Budowa związku determinuje rozmaite interakcje błonowe, co ma wpływ na oddziaływanie z komórkami oraz na ich biodostępność. Niestety, flawonoidy występują w bardzo niskich stężeniach w tkankach roślinnych, a ich przyswajalność w naturalnej formie jest niska^[2].

Dowiedziano, że metylowane flawonoidy cechują się wyraźnie podniesioną stabilnością metaboliczną oraz polepszonym transportem błonowym^[3]. Chemiczna metylacja wiąże się z niską regioselektywnością i stereospecyficznością, co komplikuje procedurę ich syntetycznego otrzymywania. Dającą dotychczas największą nadzieję metodą jest połączenie syntezy chemicznej flawonoidu z enzymatyczną metylacją prowadzoną przez mikroorganizmy^[4].

Wyselekcjonowano dwie metylotransferazy aktywne wobec grup fenolowych pierścienia B flawonoidów – 3'-O-metylotransferazę flawonu oraz 3'-O-metylotransferazę kwasu kawowego. W niniejszej pracy analizowano aktywność obu tych enzymów w warunkach *in vitro* wobec szeregu flawonoidów, a także porównano ich aktywność w warunkach *in vitro* i *in vivo*.

¹ H. Silka, H. Mansour, N. Wehbe, S. A. Nasser, R. Iratni, G. Nasrallah, A. Shaito, T. Ghaddar, F. Kobeissy, A. H. Eid, *Biomed. Pharmacother.*, 2022, 146, 112442.

² K. Niranjana, N. H. Thuan, G. P. Ghimire, D. V. Thang, J. K. Sohng, *Enzyme Microb. Technol.*, 2016, 86, 103-116.

³ T. Walle, *Inter. J. Mol. Sci.*, 2009, 10(11), 5002-5019.

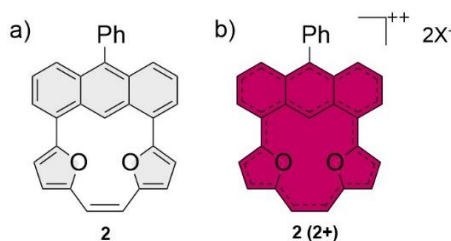
⁴ A. Krawczyk-Lebek, T. Janeczko, E. Kostrzewa-Suslow, *Catalysts*, 2020, 10, 1148.

PRÓBY SYNTETYCZNE PROWADZĄCE DO OTRZYMANIA POCHODNYCH TRIFIRYNY(2.1.1) ORAZ (1.1.1) MODYFIKOWANE W KIERUNKU ZASTOSOWAŃ W TERAPII FOTODYNAMICZNEJ

Maja Łazuchiewicz, Kevin Dalberto, Miłosz Pawlicki

Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Wydział Chemii, Zespół Funkcjonalnych Materiałów Organicznych
m.lazuchiewicz@student.uj.edu.pl

W wykonanej pracy badawczej zaprezentowano próby syntezy związków makrocyklicznych o rozszerzonej delokalizacji, wykorzystując motyw trifiryny(2.1.1) oraz (1.1.1). Celem przeprowadzonych badań było uzyskania szkieletów o modulowanej ścieżce delokalizacji, opierających się na podstawowych motywach przełącznikowych. Z przeprowadzonej analizy retrosyntetycznej wywnioskowano, iż kluczowym elementem do otrzymania oczekiwanych pochodnych jest utworzenie wiązań C-N pomiędzy pierścieniem heterocyklicznym, a nasyconym/nienasyconym fragmentem węglowym, a otrzymany tą ścieżką reagent poddany procesowi kondensacji powinien prowadzić do oczekiwanego produktu. W celu badań pracowano nad otrzymaniem układów pierścieniowych, które wykazywałyby właściwości aromatyczne lub antyaromatyczne, a dzięki występowaniu prądu pierścieniowego w zdelokalizowanych elektronach π , powodowałyby zmiany wartości przesunięć chemicznych na widmach $^1\text{H NMR}$. Omówiono również w jaki sposób ilość sprzężonych wiązań podwójnych wpływa na barwę związków chemicznych, a także jak ta zależność jest powiązana z różnicą energetyczną między orbitalami HOMO i LUMO. W ramach badań przedstawiono również efekty wprowadzenia ładunku do układów liniowych, cyklicznych oraz makrocyklicznych, dodatkowo omawiając w jaki sposób można wywołać pożądane zjawisko delokalizacji w tych układach^{1,2}.



Rysunek Wzory półstrukturalne związków makrocyklicznych z lokalną (a) oraz globalną delokalizacją (b)^[1]

Przed wszystkim chciałabym podziękować prof. dr. hab. Miłoszowi Pawlickiemu za nieocenioną opiekę naukową, cierpliwość, nieustający entuzjazm oraz wszelkie wskazówki, dzięki którym możliwe jest prowadzenie niniejszych badań.

¹ Dutta, A.; Stawski, W.; Kijewska, M.; Pawlicki, M.; *Org. Lett.*, 2021, 23, 24, 9436–9440.

² Pawlicki, M.; Hurej, K.; Kwiecińska, K.; Szterenber, L.; Latos-Grażyniński, L., *Chem. Commun.*, 2015, 51, 11362–11365.

BADANIA WŁAŚCIWOŚCI FOTOU CZULAJĄCYCH NOWYCH POCHODNYCH FULERENU C₆₀

Klaudia Nastula¹, Radosław Motyka^{1,2}, Agata Blacha-Grzechnik^{1,3}

¹Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny

²Polska Akademia Nauk, Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych

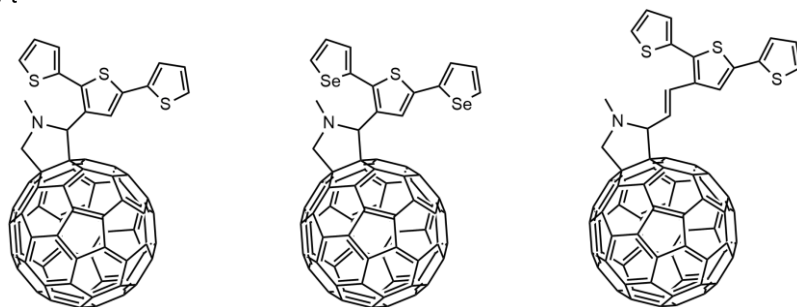
³Politechnika Śląska, Centrum Elektroniki Organicznej i Nanohybrydowej

klaupap666@student.polsl.pl

Wzrastająca popularność fulerenów i ich pochodnych na przestrzeni ostatnich lat wynika z faktu, że wykazują one interesujące właściwości do których należą między innymi duże powinowactwo względem elektronów oraz możliwość wzbudzenia przy pomocy światła o niskiej energii. Intensywnie prowadzone prace badawcze doprowadziły do otrzymania wielu materiałów zdolnych do konwersji energii słonecznej. Szerokie możliwości funkcjonalizacji pozwalają na dalszy, dynamiczny rozwój dyscypliny naukowej zwanej chemią fulerenów^[1].

Tlen singletowy ma szeroki zakres zastosowań obejmujący fotokatalizę, procesy uzdatniania wody oraz terapię fotodynamiczną, będącą skutecznym narzędziem w leczeniu nowotworów. Cząsteczki wykorzystywane do fotogeneracji powinny spełniać pewne warunki, do których należą: szerokie spektrum absorpcji w zakresie światła widzialnego lub bliskiej podczerwieni, fotostabilność oraz wysokie prawdopodobieństwo przejścia ze stanu podstawowego do wzbudzonego stanu trypletowego^[2].

Niniejsza praca przedstawia badania poświęcone pochodnym fulerenu C₆₀, będących obiecującymi fotouczulaczami. W celu określenia ich przydatności w praktyce, przeprowadzono pomiary spektroskopowe oraz oszacowano ich wydajność kwantową fotogeneracji tlenu singletowego. Co więcej, uzyskane wyniki umożliwiły ocenę wpływu funkcjonalizacji fulerenu C₆₀ na jego właściwości fotouczulające.



Rysunek Struktury badanych pochodnych fulerenu

Ta praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Nauki (numer grantu: 2016/21/D/ST5/01641).

¹ Dirk M. Guldi, *Accounts of Chemical Research*, 2000, 33(10), 695-703.

² I. Pibiri, *ChemPhotoChem*, 2018, 2, 535-547.

OPRACOWANIE PROCEDURY OSADZANIA NANOCZĄSTEK SREBRA NA PODŁOŻA NA BAZIE TLENKU TYTANU JAKO SUBSTRATÓW SERS I PIERS

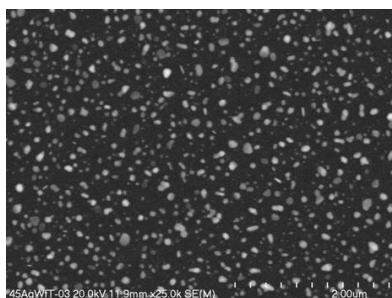
Gabriela Smaga, Łukasz Pięta, Kamilla Małek

Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Zespół Obrazowania Ramanowskiego
gabriela.smaga@student.uj.edu.pl

Hybrydowe podłoża na bazie nanocząstek metali szlachetnych i materiałów półprzewodnikowych są coraz częściej stosowane jako substraty w spektroskopii powierzchniowo wzmocnionego rozpraszania ramanowskiego (ang. *surface-enhanced Raman scattering*, SERS) oraz technice będącej jej rozwinięciem – fotoindukowanej wzmocnionej spektroskopii ramanowskiej (ang. *photo-induced enhanced Raman spectroscopy*, PIERS)^[1].

Celem prowadzonych badań było opracowanie procedury osadzania nanocząstek srebra na podłoża z dwutlenku tytanu jako substratów do pomiarów SERS i PIERS (**Rys.**). Kontrolowanie warunków fotoredukcji takich jak stężenie jonów metalu, rodzaj rozpuszczalnika, czas naświetlania oraz intensywność światła UV pozwoliło na uzyskanie nanoplatform charakteryzujących się rezonansem plazmonowym nanocząstek w zakresie od 300 nm do 450 nm. Podłoża poddano analizie pod kątem ich właściwości fizykochemicznych i możliwości wzmacniania sygnału ramanowskiego, z wykorzystaniem skaningowej mikroskopii elektronowej, spektroskopii UV-Vis oraz spektroskopii ramanowskiej.

Przygotowane nanoplatformy charakteryzowały się wysokim współczynnikiem wzmocnienia sygnału ramanowskiego, szczególnie po ich fotoaktywacji promieniowaniem UV w technice PIERS.



Rysunek Zdjęcie ze skaningowego mikroskopu elektronowego podłoża AgNSs/TiO₂

Niniejsze badania zostały sfinansowane ze środków programu „Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza” w Uniwersytecie Jagiellońskim.

¹ D. Cialla et al, *Anal. Bioanal. Chem.*, 2012, 403, 27-54.

SYNTEZA I CHARAKTERYSTYKA WŁAŚCIWOŚCI FOTOCHEMICZNYCH I FOTOFIZYCZNYCH NOWYCH FOTOU CZULACZY TRYPLETOWYCH OPARTYCH NA POCHODNYCH PERYLENOWYCH

Karolina Socha¹, Klaudia Nastula¹, Radosław Motyka², Jadranka Travaš-Sejdić³, Agata Blacha-Grzechnik^{1,4}

¹ Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów,

² Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych, PAN,

³ University of Auckland, School of Chemical Sciences,

⁴ Politechnika Śląska, Centrum Elektroniki Organicznej i Nanohybrydowej, karolina.socha@polsl.pl

Obecny wzrost lekooporności wśród bakterii w odpowiedzi na stosowane antybiotykoterapie, skłania do poszukiwania nowych rozwiązań eliminacji chorobotwórczych mikroorganizmów. Opracowanie alternatywnego sposobu eliminacji bakterii ma więc kluczowe znaczenie. Jednym z takich rozwiązań jest zastosowanie tlenu singletowego, który charakteryzuje się zwiększoną reaktywnością podyktowaną brakiem niesparowanych elektronów, dzięki czemu wykazują właściwości przeciwbakteryjne, przeciwwirusowe i przeciwgrzybicze^[1].

Tlen singletowy może powstać m.in. na drodze reakcji fotochemicznych z udziałem fotouczulaczy trypletowych. Związki te absorbują promieniowanie i przekazują część energii cząsteczkom tlenu w celu wytworzenia reaktywnych form tlenu (ROS)^[2].

W niniejszej pracy otrzymano nowe fotouczulacze trypletowe oparte o pochodne perylenowe oraz zbadano ich właściwości fotochemiczne oraz fotofizyczne. Otrzymane wyniki wskazują, że badane fotosensybilizatory cechują się dobrymi wydajnościami produkcji tlenu singletowego oraz fotostabilnością.

Badania finansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu SONATA Bis 2021/42/E/ST5/00110. K.S. dziękuje projektowi OCTA (Organic Charge Transfer Applications, 778158, Horyzont 2020). Praca naukowa finansowana ze środków finansowych na naukę w latach 2018-2023 przyznanych na realizację projektu międzynarodowego współfinansowanego.

¹ M. R. Hamblin, *Photobiol. Sci.*, 2004, 3, 436-450.

² J. Zhao, W. Wu, J. Sun, S. Guo, *Chem. Soc. Rev.*, 2013, 42, 5323-5351.

OKREŚLENIE SPECYFICZNOŚCI SUBSTRATOWEJ O-GLIKOZYLOTRANSFERAZY SgUGT74AC1 z *SIRAITIA GROSVENORII*

Aleksandra Stępień, Agata Matera, Tomasz Janeczko, Jarosław Popłoński

Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności,
Katedra Chemii Żywności i Biokatalizy
124321@student.upwr.edu.pl

Glikozylotransferazy katalizują tworzenie wiązania O-glikozydowego między aglikonem modyfikowanej cząsteczki a cukrem aktywowanym nukleotydem na szlaku Leloir'a, w celu utworzenia glikozydowej pochodnej^[1]. O-glikozylotransferaza SgUGT74AC1 wyizolowana z owoców *Siraitia grosvenorii* charakteryzuje się wysoką stereoselektywnością względem grupy C3-OH mogrolu, przedstawiciela triterpenów. Specyficzność SgUGT74AC1 została również zbadana względem innych triterpenów oraz polifenoli, w tym dwóch flawonoidów: kwercetyny i naryngeny, które uległy glikozylacji^[2].

Ukierunkowana ewolucja SgUGT74AC1 pozwoliła na zwiększenie siły oddziaływań hydrofobowych, które odgrywają kluczową rolę w zakotwiczeniu triterpenów w centrum aktywnym enzymu^[3]. W rezultacie uzyskano enzym o zwiększonej $4,17 \times 10^4$ -krotnie wydajności katalitycznej dla morgolu^[4,5]. Nie zweryfikowano jednak czy i w jaki sposób mutacja wpłynęła na specyficzność substratową uzyskanego wariantu względem flawonoidów i pochodnych triterpenów.

Celem niniejszych badań było zbadanie zdolności katalitycznej wariantu M7 SgUGT74AC1 w warunkach *in vitro* względem panelu kilkudziesięciu substratów, budową zbliżonych do triterpenów - flawonoidów oraz steroidów. Uzyskane wyniki potwierdziły zdolność mutantu M7 SgUGT74AC1 do glikozylacji pochodnych estranu oraz androstanu a także flawonoidów z grupy flawanonów, flawonów, flawonolów oraz izoflawonów.

¹ L. Mestrom, M. Przypis, D. Kowalczykiewicz, A. Pollender, A. Kumpf, S. R. Marsden, I. Bento, A. B. Jarzębski, K. Szymańska, A. Chruściel, D. Tischler, R. Schoevaart, U. Hanefeld, and P.-L. Hagedoorn. *Int. J. Mol. Sci.*, 2019, 20(21), 5263.

² L. Dai, C. Liu, Y. Zhu, J. Zhang, Y. Men, Y. Zeng, Y. Sun. *Plant Cell Physiol.* 2015, 56(6):1172-82.

³ J. Li, S. Mu, J. Yang, C. Liu, Y. Zhang, P. Chen, Y. Zeng, Y. Zhu, Y. Sun. *iScience*, 2022 25(10):105222.

⁴ J. Li, J. Yang, S. Mu, N. Shang, C. Liu, Y. Zhu, *et al.* *ACS Catal.* 2020, 10, 6, 3629–3639

⁵ S. Mu, J. Li, C. Liu, Y. Zeng, Y. Men, Y. Cai, N. Chen, H. Ma, Y. Sun. *Catalysts*. 2020; 10(12):1466.

SIŁA EKSPRESJI REKOMBINOWANYCH GLUKOZYLOTANSFERAZ A ICH AKTYWNOŚĆ W WARUNKACH *IN VITRO*

Hanna Werner, Agata Matera, Jarosław Popłoński

Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności,
Katedra Chemii Żywności i Biokatalizy
haniawerner31@gmail.com

Glukozyłacja związków flawonoidowych jest jedną z popularniejszych metod na zwiększanie ich polarności, stabilizację oraz modyfikację aktywności biologicznej^[1]. Kaskada glukozyłująca, w skład której wchodzi syntaza sacharozy (SuSy) oraz glukozylotransferaza (GT) jest obiecującym narzędziem wykorzystywanym do glukozyłacji wielu związków biologicznie aktywnych. Omawiana kaskada pozwala osiągnąć wysokie wydajności reakcji, a dzięki wewnętrznej regeneracji UDP-glukozy, będącej donorem cząsteczki cukru dla glukozylotransferaz^[2], ogranicza koszty procesu.

Komórki *Escherichia coli* są wygodną i dobrze poznaną platformą do produkcji rekombinowanych białek^[3]. Różnorodność opracowanych systemów ekspresji, plazmidów i szczepów oraz możliwość modyfikacji warunków hodowli, pozwala na wielopoziomową optymalizację procesu produkcji pożądaných białek^[4].

W niniejszym badaniu zweryfikowano jak rodzaj miejsca inicjacji replikacji plazmidu (ang. *Origin of replication*, ORI) wpływa na koekspresję w komórkach *E. coli* syntazy sacharozy z soi (*GmSuSy*)^[5] i glukozylotransferazy z tarczycy bajkalskiej (*SbaiC7OGT*)^[6], tworzących wydajną kaskadę glikozylującą flawonoidy, która według wstępnych badań pozwala na osiągnięcie produkcji 7-O-glukozydu naryngeniny na poziomie 1 g/L. W badaniu porównano trzy ORI o różnej kopijności – pRRB1, pUC oraz pRK2. Uzyskane wyniki pozwoliły na dopracowanie etapu produkcji biokatalizatora, dopasowanego do selektywnej glukozyłacji flawonoidów.

¹ B. Yang, H. Liu, J. Yang, V. K. Gupta, Y. Jiang, *Trends Food Sci. Technol.*, 2018, 79, 116-124.

² A. Gutmann, B. Nidetzky, *Adv. Synth. Catal.*, 2016, 358, 3600-3609.

³ G. L. Rosano, E. A. Ceccaarelli, *Front. Microbiol.*, 2014, 5, 1-17.

⁴ Packiam K.A.R., Ramanan R.N., Ooi C.W., Krishnaswamy L., Tey B.T., *Appl. Microbiol. Biotechnol.*, 2020, 104, 3253-3266.

⁵ A. Gutmann, A. Lepak, M. Diricks, T. Desmet, B. Nidetzky, *Biotechnol. J.*, 2014, 12, 1600557.

⁶ M. Hirotoni, R. Kuroda, H. Suzuki, T. Yoshikawa, *Planta*, 2000, 210, 1006-1013.



**CHEMIA MATERIAŁÓW
I NANOTECHNOLOGIA**

CHARAKTERYZACJA PROCESU OCZYSZCZANIA WODY PRZY UŻYCIU NANORUREK WĘGLOWYCH

Łukasz Czapura¹, Grzegorz Stando^{1,2}, Dawid Janas¹

¹Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny

²Uniwersytet Pittsburski, Wydział Chemiczny

l.czapura@gmail.com

Zanieczyszczenie środowiska organicznymi substancjami aromatycznymi^[1] zmusza naukowców do poszukiwania skutecznych i efektywnych metod usuwania tych związków. Jednym z obiecujących materiałów są nanorurki węglowe (CNTs), które ze względu na swoje właściwości, takie jak duża powierzchnia właściwa^[2] i wysokie powinowactwo do związków aromatycznych^[3], są często wskazywane jako potencjalne rozwiązanie tego problemu. Opracowanie nieskomplikowanej, łatwo skalowalnej i podatnej na modyfikacje metody produkcji arkuszy jednościennych nanorurek węglowych (SWCNTs)^[4] otwiera nowe możliwości w wykorzystaniu nanorurek jako sorbentów.

Celem pracy było zbadanie możliwości usuwania zanieczyszczeń organicznych z roztworów przy użyciu arkuszy jednościennych nanorurek węglowych. Jako substancje wzorcowe wybrano trzy związki aromatyczne: błękit metylenowy, fluoresceinę i oranż metylowy, z których przygotowano roztwory wodne o dokładnie znanym stężeniu. Następnie scharakteryzowano właściwości sorpcyjne materiału węglowego i zbadano wpływ metody przygotowania arkusza na przebieg procesu.

W trakcie badań skupiono się na określeniu pojemności sorpcyjnej i szybkości adsorpcji, a także na zbadaniu możliwości prowadzenia selektywnego usuwania jednego rodzaju związków z mieszanin. Otrzymane wyniki są zgodne z obliczeniami teoretycznymi^[5] dotyczącymi występowania różnego powinowactwa w zależności od struktury cząsteczki. Zaprezentowane badania stanowią solidną podstawę do dalszego ulepszenia metody oczyszczania wody, a także do wyznaczenia nowych ścieżek rozwoju w kierunku rozdziału złożonych mieszanin posyntezywych.

Praca naukowa współfinansowana ze środków budżetowych na naukę w latach 2019-2023 w ramach programu „Diamantowy Grant” (nr umowy 0036/DIA/201948). Ł. C., G. S., D. J. dziękują Narodowemu Centrum Nauki (UMO-2019/33/B/ST5/00631) za współfinansowanie badań oraz pokrycie kosztów udziału w konferencji. G. S. dziękuje NSF (CBET-2028826) za częściowe sfinansowanie pracy i NAWA za sfinansowanie stażu naukowego (Program im. Iwanowskiej edycja 2019 PPN/IWA/2019/1/00017), który dał część wyników.

¹ E. Felis et al, *Eur. J. Pharmacol.*, 2020, 866, 172813.

² A. Peigney, et al., *Carbon*, 2001, 39, 507-514.

³ O. Apul, et al., *Water Res.*, 2015, 68, 34-55.

⁴ G. Stando., et al., *Sci. Rep.*, 2022, 12, 4358.

⁵ S. Lata, Vikas, *J. Mol. Graph. Model.*, 2018, 85, 232-241.

KONTROLA STRUKTURY MAKROSKOPOWYCH SIECI Z NANORUREK WĘGLOWYCH ORAZ JEJ WPŁYW NA WŁAŚCIWOŚCI MATERIAŁU

Jakub Ćwiertnia¹, Grzegorz Stando^{1,2}, Dawid Janas¹

¹Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny

²Uniwersytet Pittsburski, Wydział Chemiczny

j.m.cwiertnia@gmail.com

Nanorurki węglowe wykazują imponujące właściwości elektryczne^[1] oraz termiczne^[2]. Posiadają one potencjał, aby zastąpić oraz wesprzeć obecnie stosowane materiały takie jak miedź^[3] bądź cyna^[4]. Możliwość ich wytwarzania z surowców pochodzących z źródeł odnawialnych^[5] pozwala na transformację w kierunku zielonej chemii oraz gospodarki obiegu zamkniętego.

W naszym badaniu skupiliśmy się na wytwarzaniu arkuszy z jednościennej nanorurek węglowych (SWCNTs z ang. Single-Walled Carbon Nanotubes) oraz kompozytów z zastosowaniem zredukowanego tlenku grafenu (rGO z ang. Reduced Graphene Oxide). Badano jaki jest wpływ zawartości komponentów na uzyskane właściwości. Ponadto w doświadczeniu sprawdzono jaki efekt na właściwości oraz strukturę wywiera grubość wytwarzanego arkusza. Otrzymane materiały poddano badaniom powierzchni, wytrzymałości fizycznej, przewodnictwa elektrycznego i termicznego oraz zmierzono współczynnik Seebecka.

Zaprezentowana metodyka wytwarzania posiada potencjał do praktycznego zastosowania ze względu na łatwość w skalowaniu. Co więcej, otrzymane materiały posiadały atrakcyjne właściwości takie jak wysokie przewodnictwo elektryczne 1200 S/cm i duży współczynnik Seebecka 43,6 $\mu\text{V/K}$ w temperaturze 40°C. Dalsze tworzenie i ulepszanie metody np. poprzez wykorzystanie innych komponentów stwarza potencjał do rozwoju dalszych badań, a wyprodukowane materiały mogą mieć liczne zastosowania.

Praca naukowa współfinansowana za środków budżetowych na naukę w latach 2019-2023 w ramach programu „Diamentowy Grant” (nr umowy 0036/DIA/201948). J.Ć., G.S., D. J. dziękują Narodowemu Centrum Nauki (UMO-2019/33/B/ST5/00631) za współfinansowanie badań oraz pokrycie kosztów udziału w konferencji. G. S. dziękuje NSF (CBET-2028826) za częściowe sfinansowanie pracy i NAWA za sfinansowanie stażu naukowego (Program im. Iwanowskiej edycja 2019 PPN/IWA/2019/1/00017), który dał część wyników.

¹ K. S. Ibrahim, et al., *Carbon letters*, 2013, 14, 131–144.

² X.-Y. Fang, et al., *Physics Letters A*, 2015, 379(37), 2245–2251.

³ S. L. Zhang, et al., *Adv. Electron. Mater.*, 2019, 5, 1800811.

⁴ N. Karousis, et al., *Chem. Rev.*, 2010, 110, 9, 5366–5397.

⁵ M. Bernd, et al. *J. Mater. Res. Technol.*, 2017, 6(2), 171–177.

OBRÓBKA WYKOŃCZENIOWA STOPÓW ALUMINIUM Z WYKORZYSTANIEM ZJAWISKA ISKRZENIA MIĘKKIEGO PODCZAS PLAZMOWEGO UTLENIANIA ELEKTROLITYCZNEGO

Julia Grzonka, Aleksander Olesiński, Maciej Sowa, Wojciech Simka

Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny
juligrz221@student.polsl.pl

W celu poprawy właściwości stopów metali lekkich, poszerzającej zakres ich zastosowań, opracowywane są nowe metody obróbki wykończeniowej tych materiałów. Sposobem na zwiększenie wytrzymałości mechanicznej powierzchni metalowych może być formowanie na nich ochronnych powłok tlenkowych dzięki plazmowemu utlenianiu elektrolitycznemu (PEO; ang. *plasma electrolytic oxidation*)^[1]. Proces ten prowadzi do wytworzenia stosunkowo grubej, twardej, ale i porowatej warstwy tlenku chroniącej metal podłoża. Aby w pewnym stopniu ograniczyć destrukcyjny wpływ mających miejsce w trakcie procesu mikrowyładowań, wykorzystywane jest zjawisko iskrzenia miękkiego (ang. *soft sparking*)^[2]. Występowanie w uformowanej warstwie tlenkowej mikroporów może być korzystne z punktu widzenia inżynierii materiałowej, ponieważ daje szerokie możliwości w zakresie dalszej modyfikacji właściwości powierzchni poprzez wprowadzanie do nich różnych substancji.

W niniejszej pracy serię próbek stopu aluminium AW-6061 poddano procesowi PEO w warunkach prądu przemiennego, w warunkach iskrzenia miękkiego. Po głębokim oczyszczeniu i wysuszeniu, pokryte warstwą tlenku próbki barwiono w roztworze nigrozyny spirytusowej w etanolu przy użyciu ultradźwięków. Celem zabezpieczenia przed wymywaniem zaadsorbowanego barwnika i zapewnienia trwałości barwy, próbki te poddano kolejnemu procesowi PEO, przy czym tym razem dla każdej próbki zastosowano inne parametry procesowe. Na koniec próbki ponownie barwiono.

Wskutek zastosowania opisanej powyżej procedury dwuetapowego barwienia uzyskano powłokę tlenkową różniącą się intensywnością barwy dla różnych parametrów prądu przepływającego przez układ w trakcie procesu utrwalania barwy. Badanie powierzchni za pomocą goniometru wykazało także zwiększenie kąta zwilżania (do nawet 90°) dla warstwy zabarwionej w porównaniu z powierzchnią niemodyfikowaną po PEO. Później przygotowane próbki poddano również badaniom korozyjnym (roztwór 3,5% NaCl; 30°C; badania impedancyjne i polaryzacja liniowa).

Praca finansowana przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w ramach programu LIDER XI (nr projektu: LIDER/30/0116/L-11/19/NCBR/2020; Kierownik: dr inż. Maciej Sowa; wartość dofinansowania: 1 500 000 zł)

¹ T.W. Clyne, S.C. Troughton, *Int. Mater. Rev.*, 2019, 64(3), 127–162.

² D.-S. Tsai, C.-C. Chou, *Metals*, 2019, 8(2), 105.

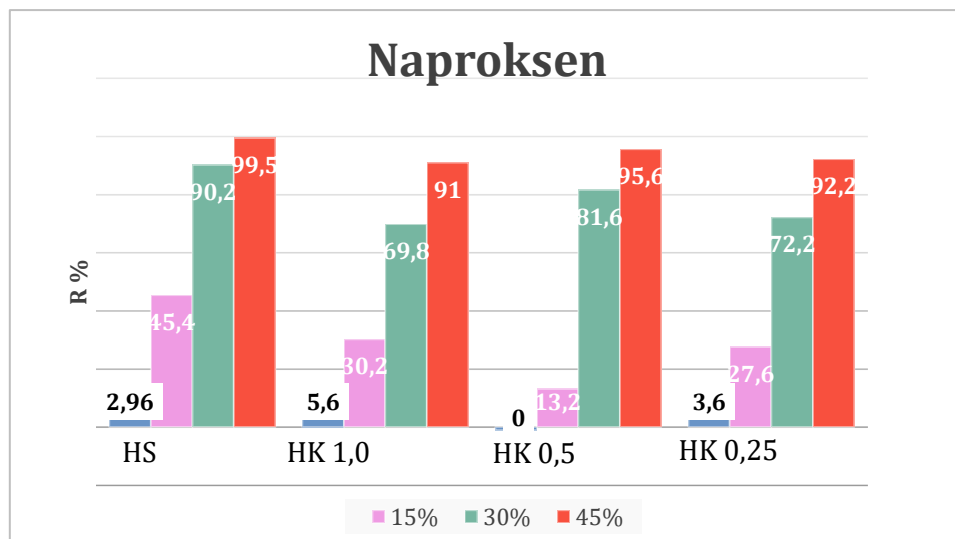
ZASTOSOWANIE KOMPOZYTÓW HALOIZYTOWO-WĘGLOWYCH DO USUWANIA WYBRANYCH FARMACEUTYKÓW ZE ŚRODOWISKA WODNEGO

Magdalena Majer, Beata Szczepanik

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych
majerka23@gmail.com

W ostatnich latach minerał haloizytowy budzi wśród badaczy coraz większe zainteresowanie jako atrakcyjny materiał do usuwania farmaceutyków z roztworów wodnych. Jego główne zalety jako adsorbentu to: morfologia nanorurkowa, duża powierzchnia właściwa i porowatość, obojętność chemiczna w szerokim zakresie pH oraz możliwość modyfikacji^[1] jego powierzchni. Minerał ten występuje naturalnie w środowisku, w związku z czym otrzymywanie adsorbentów haloizytowych nie wymaga wysokich nakładów finansowych.

W niniejszej pracy badano zastosowanie nowych kompozytów haloizytowo-węglowych do usuwania naproksenu ze środowiska wodnego. Przeprowadzono syntezę kompozytów z roztworem sacharozy o stężeniu 15, 30 i 45% m/m (prekursor węgla) oraz haloizytem surowym (HS) i kalcynowanym (HK) w atmosferze azotu w temperaturze 800°C. Zbadano wpływ czasu kontaktu i masy adsorbentu na adsorpcję naproksenu oraz wpływ stężenia farmaceutyku na proces jego usuwania z roztworu.



Schemat Zależność stopnia usuwania naproksenu R (%) od rodzaju adsorbentu

¹ S. Sadjadi, *Appl. Clay Sci.*, 2020, 189, 105537.

NANOSTRUKTURY WĘGLOWE HYDROFILOWE, CZY HYDROFOBOWE?

Grzegorz Stando^{1,2}, Haitao Liu², Lei Li³, Dawid Janas¹

¹Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny

²Uniwersytet Pittsburski, Wydział Chemiczny

³Uniwersytet Pittsburski, Wydział Inżynierii Chemicznej i Naftowej

Grzegorz.Stando@polsl.pl

Nanostruktury węglowe mają duży potencjał aplikacyjny w następujących obszarach: filtracja^[1], systemy magazynowania energii^[2] i elektronika organiczna^[3]. Zwilżalność jest kluczowym parametrem determinującym możliwość ich zastosowania. Obecnie uważa się, że powierzchnia nanowęglowa jest hydrofobowa. Jednakże coraz więcej publikacji naukowych demonstruje, że prawdziwy charakter ich powierzchni jest hydrofilowy^[4,5]. Jako przyczynę hydrofobowości wskazuje się nieokreślone węglowodory, które są adsorbowane na ich powierzchni z powietrza.

Celem badań było ustalenie prawdziwego charakteru powierzchni materiałów nanowęglowych oraz przyczyn ich hydrofobowości. Zbadano powierzchnię następujących nanostruktur: fulerenu C₆₀, jednościennych nanorurek węglowych (SWCNTs), jednowarstwowego grafenu (SLG) osadzonego na folii miedzianej. Do określenia charakteru powierzchni wykorzystano kąt zwilżania wodą (WCA). Próbkę wygrzano w atmosferze H₂/Ar (C₆₀ i SLG) i powietrzu (SWCNTs) w celu usunięcia zanieczyszczeń powierzchniowych. Początkowo C₆₀ i SWCNTs były hydrofobowe (WCA > 90°), a SLG był lekko hydrofilowy (około 80°). Po wygrzaniu powierzchni wszystkie mają charakter silnie hydrofilowy. Nanomateriały scharakteryzowano za pomocą metod spektroskopowych i mikroskopowych. Obliczono również swobodną energię powierzchniową dla wszystkich badanych próbek. Na podstawie uzyskanych danych stwierdzono jednoznacznie, że nanostruktury nie zostały uszkodzone podczas procesu oczyszczania powierzchni, a główną przyczyną hydrofobowości powierzchni są węglowodory aromatyczne^[6].

Praca naukowa finansowana za środków budżetowych na naukę w latach 2019-2023 w ramach programu „Diamantowy Grant” (nr umowy 0036/DIA/201948. G. S. i H. L. dziękują NSF (CBET-2028826) za częściowe sfinansowanie pracy. G.S. dziękuje NAWA za sfinansowanie stażu naukowego (Program im. Iwanowskiej edycja 2019 PPN/IWA/2019/1/00017), który pozwolił na uzyskanie części wyników eksperymentalnych. G.S. dziękuje Unii Europejskiej za sfinansowanie udziału w konferencji (Europejski Fundusze Społeczny, grant nr POWR.03.05.00-00-Z305).

¹ U. Chadha et al., *Mater. Res. Express*, 2022, 9, 012003.

² S.-B. Yoon et al., *J. Power Sources*, 2011, 196(24), 10791-10797.

³ D. Jariwala et al., *Chemical Society Reviews*, 2013, 42, 2824-2860.

⁴ F. Yang et al., *Acc. Mater. Res.*, 2022, 10(3), 1022-1032.

⁵ G. Stando et al., *Appl. Surf. Sci.*, 2019, 486, 227-233.

⁶ G. Stando et al. (w przygotowaniu).



**CHEMIA MEDYCZNA
I LEKÓW**

ALGINIAN SODU I POLIWINYLOPIROLIDON W FORMIE HYDROŻELU JAKO BAZA OPATRUNKU

Joanna Barczyk, Maria Kaniecka, Joanna Skopińska-Wiśniewska

Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Chemii
marasiaek@gmail.com

Historia opatrywania ran sięga już starożytności, gdzie używano różnych materiałów by zatrzymać krwawienie, wchłonąć wysięk, czy stworzyć warunki do gojenia. Stosowano różne substancje jak na przykład: tłuszcze zwierzęce, oliwę, miód, czy liście. Obecnie stosuje się bardziej nowoczesne materiały jak gaza, która wykonana została z między innymi tkanych włókien bawełny, folie wykonane z poliuretanu, czy hydrożele. Najważniejszym aspektem w trakcie gojenia się ran jest zapewnienie odpowiednich warunków. Idealny opatrunek powinien tworzyć wilgotne, czyste i ciepłe środowisko, pochłaniać wysięki, zapewniać ochronę także okolicy wokół rany, jak również minimalizować ból przy jego usuwaniu. Opatrunek zapewnia odpowiednią ochronę przed infekcją bakteryjną rany oraz nie jest toksyczny czy drażniący dla tkanek. Z tych powodów stosowanie opatrunków hydrożelowych jest najbardziej zasadne. Hydrożele to materiały zbudowane z usieciowanych polimerów, które mogą wchłonąć znaczną ilość płynu poprzez pęcznienie, ale mogą również oddawać wilgoć do suchej rany, by utrzymać w niej odpowiednie środowisko^[1,2].

Do otrzymania opatrunku hydrożelowego zastosowano dwa hydrofilowe polimery, naturalny oraz syntetyczny. Alginianu sodu to polisacharyd, który otrzymywany jest z alg brunatnych i może być sieciowany przy użyciu jonów wapnia, w efekcie tworząc stabilne hydrożele. Drugim stosowanym polimerem był poliwinylpirolidon (PVP), który w przemyśle farmaceutycznym najczęściej stosowany jest jako nośnik substancji leczniczych^[1,3]. Początkowy etap badań obejmował dobranie stężeń PVP i alginianu sodu, by otrzymany hydrożel był odpowiednio odporny na zrywanie, nie kruszył się i był transparentny. Roztwory zawierające oba polimery sieciowano chlorkiem wapnia. Hydrożele zawierające 1% lub 2% poliwinylpirolidonu oraz 1%, 1,5% lub 2% alginianu sodu poddano badaniu wytrzymałości na zerwanie. Otrzymane wyniki wykazały, że najlepsze właściwości mechaniczne posiadają dwa układy zawierające odpowiednio: 1% PVP i 1,5% alginianu sodu oraz 1% PVP i 2% alginianu sodu.

Projekt finansowany w ramach „Grants4NCUStudents” (Decyzja nr 36/2022/Grants4NCUStudents).

¹ L. Pereira, J. Cotas, *Alginate- Recent Uses of This Natural Polymer*, Intech Open, Internet, 2020, 1-16.

² P. Franco, I. De Marco, *Polymers*, 2020, 12, 1114.

³ A. Sood, M. S. Granick, N. L. Tomaselli, *Adv. Wound Care*, 2014, 3, 511-529.

ZA SZYBKO LUB ZA WOLNO – O ZABURZENIACH RYTMU SERCA U PACJENTÓW PEDIATRYCZNYCH

Nikola Fajkis-Zajączkowska

Uniwersytet Jagielloński, Collegium Medicum, Wydział Farmaceutyczny
Cardiomatics
nikola.fajkis@doctoral.uj.edu.pl

Zaburzenia rytmu serca (arytmie) możemy podzielić na bradyarytmię, jeśli rytm jest zbyt wolny, oraz tachyarytmię, jeśli jest zbyt szybki^[1]. W populacji dziecięcej najczęściej zgłaszaną arytmia jest częstoskurcz zatokowy, który stanowi około 13%, oraz bradykardia stanowiąca około 6% wszystkich przypadków^[2].

Zburzenia rytmu powstają, w wyniku zbyt szybkiego lub zbyt wolnego generowania impulsów w układzie przewodzącym lub w sytuacji, gdy są one generowane poza układem przewodzącym^[3]. Arytmia może być również konsekwencją niektórych infekcji, zapalenia mięśnia sercowego lub przyjmowania niektórych leków.

Diagnostyka arytmii odbywa się w oparciu o wyniki uzyskane podczas spoczynkowego i/lub wysiłkowego zapisu EKG, ale także poprzez badanie EKG metodą Holtera, które polega na ciągłej rejestracji zapisu EKG, nawet do kilku tygodni^[4]. To ostatnie podejście pozwala lekarzowi na dogłębną analizę nieprawidłowości rytmu, które pojawiają się rzadko i byłyby niewykryte w przypadku badania spoczynkowego lub wysiłkowego.

Niestety takie podejście wiąże się z ogromnym nakładem pracy, który musi wykonać lekarz, aby ocenić szczegółowo i z należytą starannością tak długi zapis. Powoduje to nie tylko znużenie samą pracą, ale przede wszystkim wydłużenie czasu oczekiwania na wizytę innych pacjentów. W celu optymalizacji tego procesu powstają algorytmy oparte na sztucznej inteligencji, które po przeanalizowaniu dostarczonego sygnału, dostarczają lekarzowi raport z informacjami o nieprawidłowościach w rytmie.

Projekt współfinansowany przez Unię Europejską ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Inteligentny Rozwój. Projekt realizowany jest w ramach Narodowego Centrum Badań i Rozwoju: Szybka ścieżka: "6 / 1.1.1 / 2020 SS Big/MSP/JN 4".

¹ R. Adwan, *Prog. Pediatr. Cardiol.*, 2022, 65, 101520.

² M. Silka, *IPEJ*, 2021, 21(6), 349-366.

³ C. Antzelevitch, *Card. Electrophysiol. Clin.*, 2011, 3(1), 23-45.

⁴ C. Hanash, *J. Emerg. Trauma Shock*, 2010, 3(3), 251-260.

OPATRUNKI HYDROŻELOWE NA BAZIE POLIWINYLOPIROLIDONU I GUMY GELLAN

Maria Kaniecka, Joanna Barczyk, Joanna Skopińska-Wiśniewska

Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
maria.kaniecka08@gmail.com

W dzisiejszych czasach problem trudno gojących się ran, pomimo wielu lat poszukiwań, nadal nie znajduje satysfakcjonującego rozwiązania. Istnieje wiele czynników, które przyczyniają się do powstawania takich ran i utrudniają ich gojenie. Z tego powodu naukowcy rozpatrują wiele metod i materiałów, które ułatwiłyby regenerację uszkodzonej skóry. Innowacyjnym rozwiązaniem, które daje obiecujące rezultaty jest zastosowanie opatrunków hydrożelowych. Hydrożele są hydrofilowymi, trójwymiarowymi sieciami polimerowymi zdolnymi do absorbowania dużych ilości wody lub płynów biologicznych. Mają również potencjał do pełnienia roli nośnika leków lub innych substancji aktywnych. Między innymi te cechy czynią je idealnymi materiałami jako opatrunki na trudno gojące się rany^[1].

Poli(winylopirolidon) (PVP) to syntetyczny polimer rozpuszczalny w wodzie o akceptowalnej biogodności. Tworzy hydrożele charakteryzujące się dużą przezroczystością, elastycznością i łatwością wymiany, jednak dość słabymi właściwościami mechanicznymi i niską zdolnością pęcznienia^[2]. Guma gellan jest polisacharydem pochodzenia bakteryjnego. Posiada właściwości stabilizujące i żelujące, oraz umożliwia zatrzymanie wilgoci i przedłużenie okresu trwałości produktu^[3,4].

Celem badań było opracowanie opatrunku na bazie poli(winylopirolidonu) i gumy gellan. Sporządzono roztwory zawierające 5% oraz 8% PVP oraz 2%, 1,5% i 1% gumy gellan i poddano je sieciowaniu przy pomocy 1% roztworu chlorku wapnia. Otrzymano hydrożele, które przetestowano pod kątem właściwości mechanicznych. Stwierdzono, że zadowalające właściwości posiadają układy zawierające PVP + guma gellan- 5%+1,5%; 8%+1%; 8%+1,5%.


Projekt finansowany w ramach „Grants4NCUStudents” (Decyzja nr 36/2022/Grants4NCUStudents).

¹ Q. Chai, Y. Jiao, X. Yu, *Gels*, 2017, 3(1), 1-15.

² N. Roy, N. Saha, “PVP-BASED HYDROGELS: SYNTHESIS, PROPERTIES AND APPLICATIONS”, 2016, p.1-3.

³ N. Jindal, J. Singh Khattar, *Biopolymers for Food Design*, 2018, p.95-123.

⁴ H. Zhang, F. Zhang, R. Yuan, *Hydrogels Based on Natural Polymers*, 2020, p.357-410.



**CHEMIA NIEORGANICZNA
I KOORDYNACYJNA**

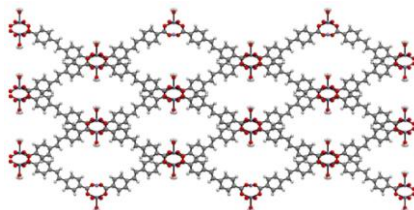
WIELOWYMIAROWE POLIMERY KOORDYNACYJNE OPARTE NA KWASIE 4,4'-STILBENODIKARBOKSYLOWYM ORAZ WYBRANYCH JONACH METALI

Marcin Groszek, Renata Łyszczek, Agnieszka Ostasz, Dmytro Vlasyuk

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Instytut Nauk Chemicznych, Katedra Chemii Ogólnej, Koordynacyjnej i Krystalografii, Wydział Chemii
marcin.groszek@mail.umcs.pl

Wielowymiarowe polimery koordynacyjne znajdujące się w centrum zainteresowania wielu zespołów badawczych są szeroko opisywane w najnowszej literaturze naukowej^[1]. Mimo tak dużej liczby scharakteryzowanych polimerów koordynacyjnych wciąż istnieje cały szereg związków, których właściwości strukturalne i fizykochemiczne nie są w pełni poznane. Wielowymiarowe polimery koordynacyjne znajdują zastosowanie m.in. w transporcie substancji aktywnych np. leków czy sorpcji metali ciężkich^[2,3]. Takie kierunki rozwoju tych związków są dużym wyzwaniem w dobie coraz większego zanieczyszczenia środowiska oraz pojawiającymi się chorobami cywilizacyjnymi. Nowe połączenia koordynacyjne stwarzają możliwości otrzymania związków o lepszych właściwościach w porównaniu do już znanych substancji.

Otrzymano dwa trójwymiarowe polimery koordynacyjne z kwasem 4,4'-stilbenodikarboksylowym (H₂SDC) na bazie jonów metali przejściowych. Pierwszy związek został zsyntezowany z jonami kobaltu(II) metodą solwotermalną, gdzie rozpuszczalnikiem był DMF, natomiast drugi związek opierał się na jonach cynku(II) i został otrzymany metodą sonochemiczną. Wyżej opisane polimery koordynacyjne zostały scharakteryzowane za pomocą następujących metod: ATR-FTIR, TG-DSC, TG-FTIR oraz analizą rentgenostrukturalną monokryształów.



Schemat Fragment struktury ZnSDC widok wzdłuż osi c, kolor czerwony – atomy tlenu, kolor szary - atomy węgla oraz kolor jasno niebieski – atomy cynku.

¹ J.W.M. Osterrieth, D. Fairen-Jimenez, *Biotechnol. J.*, 2021, 16, 2000005.

² R. Freund, O. Zaremba, G. Arnauts, R. Ameloot, G. Skorupskii, M. Dincă, A. Bavykina, J. Gascon, A. Ejsmont, J. Goscińska, M. Kalmutzki, U. Lächelt, E. Ploetz, C. S. Diercks, S. Wuttke, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2021, 60, 23975.

³ G. Xu, Z. An, K. Xu, Q. Liu, R. Das, H. Zhao, *Coord. Chem. Rev.* 2021, 427, 213554.

PRÓBY OTRZYMANIA NOWYCH ZWIĄZKÓW KOORDYNACYJNYCH JONÓW METALI d^6 OPARTYCH NA 3,5-DIMETYLOFENYLOPIRAZOLU – STRUKTURA I CHARAKTERYSTYKA SPEKTROSKOPOWA

Karol Okła¹, Klaudia Kańska¹, Joanna Masternak¹, Barbara Barszcz¹, Katarzyna Kazimierczuk²

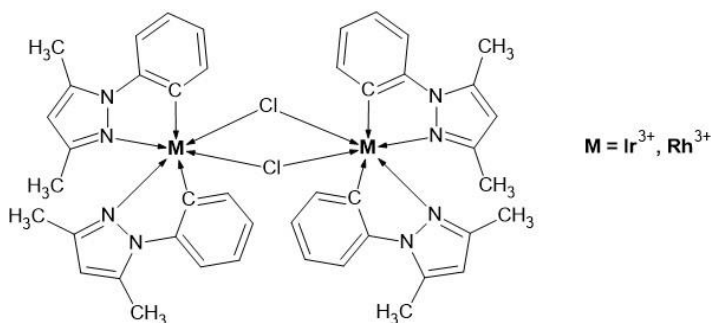
¹Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Instytut Chemii

²Politechnika Gdańska, Wydział Chemii

karol.okla@onet.pl

Na przestrzeni ostatnich lat w literaturze można zauważyć wzrost zainteresowania C,N-donorowymi związkami koordynacyjnymi jonów rodu i irydu. Preparatyka związków docelowych wymaga najpierw otrzymania prekursora w postaci kompleksu dwurdzeniowego, który następnie jest stosowany do syntezy związków cyklometalowanych. Z punktu widzenia potencjalnych zastosowań otrzymywane związki wykazują zazwyczaj pożądaną aktywność cytotoksyczną^[1,2] czy ciekawe właściwości luminescencyjne^[3].

Prezentowane badania dotyczą prób syntezy nowych kompleksów dwurdzeniowych rodu i irydu oraz ich charakterystyki fizykochemicznej. W wyniku reakcji chlorku odpowiednio rodu lub irydu z 3,5-dimetylo-1-fenylopirazolem (L) otrzymano dimeryczne związki pełniące funkcję prekursorów do dalszych syntez. Otrzymane, nowe związki koordynacyjne poddano badaniom fizykochemicznym z wykorzystaniem następujących metod: analizy elementarnej, spektroskopii w podczerwieni oraz zakresu ultrafioletu i światła widzialnego oraz dyfrakcji rentgenowskiej na monokryształach (SC-X-ray).



Schemat. Wzór strukturalny związków dwurdzeniowych $[M(L)_2Cl]_2$.

¹ C. G. L. Nongpiur *et al.*, *Polyhedron*, 2022, 221, 115855.

² L. Guo *et al.*, *Bioorg. Chem.*, 2021, 116, 105311.

³ X. Yang *et al.*, *Chem. Eng. J.*, 2020, 391, 123505.

ORGANOLANTHANIDE COMPLEXES WITH LARGE AROMATIC LIGANDS

Jakub Piątkowski, Grégory Danoun, Grégory Nocton

Ecole Polytechnique, Laboratoire de Chimie Moléculaire (LCM)
j.piatkowski2@student.uw.edu.pl

The organometallic chemistry of lanthanides has long been dominated by the use of the classical 5-membered monoanionic cyclopentadienyl (Cp) ligand and its derivatives^[1]. Another major impetus in the organolanthanide chemistry was brought by the introduction of the larger and dianionic cyclooctatetraene (COT) ligand, which led to the synthesis and characterisation of numerous examples of lanthanide complexes^[2]. With the exception of the COT ligand, organolanthanide complexes containing large aromatic ligands (7 or more atoms in the ring system) are relatively scarce.

Over the past few years, we have been interested in the development of novel lanthanide complexes featuring large carbon-based ligands, especially the monoanionic 9-membered cyclononatetraenyl (Cnt) ligand (Figure)^[3]. Such ligands may confer promising magnetic properties to the corresponding Ln complexes, as well as provide modular coordination modes. For example, using the Cnt ligand, linear and propeller-like complexes were obtained using divalent and trivalent lanthanides, respectively (Figure)^[4].

Current research ongoing in our laboratory is directed to the design of novel organolanthanide complexes containing larger and more expanded aromatic ligands in order to tune their magnetic and structural properties.

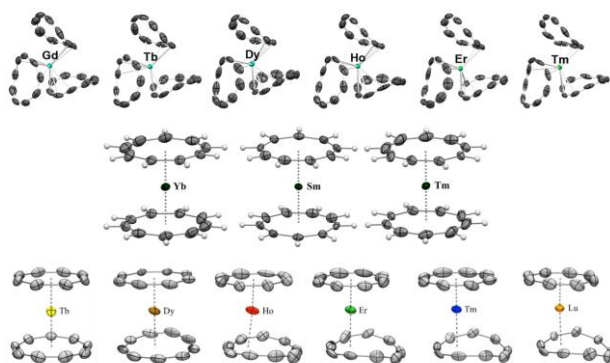


Figure Organolanthanide complexes containing large aromatic ligands developed by our group.

¹ G. Wilkinson, J. M. Birmingham, *J. Am. Chem. Soc.*, 1954, 76, 6210.

² K. O. Hodgson, F. Mares, D. F. Starks, A. Streiwieser, *J. Am. Chem. Soc.*, 1973, 95, 8650.

³ M. Xemard, S. Zimmer, M. Cordier, V. Goudy, L. Ricard, C. Clavaguera, G. Nocton, *J. Am. Chem. Soc.*, 2018, 140, 14433.

⁴ O. Stetsiuk, L. La Droitte, V. Goudy, B. Le Guennic, O. Cador, G. Nocton, *Organometallics*, 2022, 41, 133.

STUDY OF THE COORDINATION BEHAVIOR OF 8- HYDROXYQUINOLINE-2-CARBOXYLIC ACID (8-HQA) TOWARDS Ga(III) IONS IN AQUEOUS SOLUTION

Izabela Ryza¹, Beata Godlewska-Żyłkiewicz¹, Demetrio Milea², Sofia Gama^{1,3}

¹ Department of Analytical and Inorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Białystok

² Dipartimento di Scienze Chimiche, Biologiche, Farmaceutiche ed Ambientali, CHIBIOFARAM, Università degli Studi di Messina

³ Centro de Ciências e Tecnologias Nucleares, Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa
izabelaryza@gmail.com

The development in coordination chemistry has enriched medicine with new pharmaceuticals and therapies, such as chelation therapy. The properties of chelating agents do not end on removing metals from organisms. They are also involved, for example, in absorption mechanisms of fundamental micronutrients for bacteria and some eukaryotes. In particular, siderophores, which are high iron affinity chelating agents, are synthesized by bacteria in order to uptake and mobilize iron from the environment. 8-HQA was recognized as a siderophores and is continuously being studied in order to better understand its properties. It was found in the gut of insects, which have shown the presence of rich microbiota. Since microorganisms produce siderophores in order to uptake iron, it was stated that the amount of iron in the diet of insects has a direct impact on the population of its microbiota. Studies conducted over systems containing 8-HQA and iron have shown not only a potential therapeutic use of this system in chelation therapy, but also could help in the development of new strategies for manipulation of microbiota regulation and antimicrobial activity^[1].

As the system presented above has a lot of potential, the question arose of how to study it better – thus it was decided to investigate the system of 8-HQA with gallium. The explanation for the choice of gallium has many aspects: i) gallium and ferric iron have similar coordination chemistry; ii) ⁶⁷Ga radioisotope has the ability to generate gamma rays, which allows it to be used as a radiotracer in techniques of tissue imaging, such as Positron Emission Tomography (PET). For comparison, through PET imaging with ⁶⁷Ga, it would be possible to determine how Fe³⁺ with 8-HQA distributes in a given environment. In this communication we will present the study of the binding ability of 8- HQA towards Ga³⁺. Stability constants of species formed in the studied system obtained by ISE-H+ (glass electrode) potentiometric, in KCl_(aq) at $I = 0.2 \text{ mol}\cdot\text{dm}^{-3}$ and $T = 298.15 \text{ K}$ measurements will be discussed. The presence of the species [Ga(8-HQA)₂] was confirmed by ESI-MS.

Acknowledgements: The authors thank to the National Science Centre (NCN), Poland, for the financing under the research project number 2020/39/B/ST4/03060.

¹ S. Gama, *New J. Chem.*, 2018, 42(10), 8062-8073.



**CHEMIA ORGANICZNA
I SUPRAMOLEKULARNA**

JAK ZAOSZCZĘDZIĆ PIENIĄDZE I CIERPLIWOŚĆ? ANALIZA RETROSYNTETYCZNA WG. COREYA

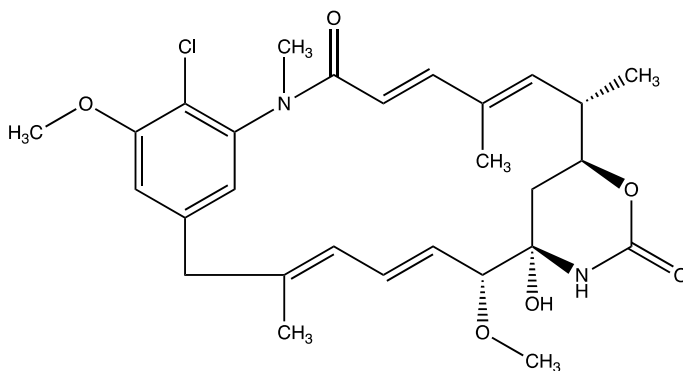
Konrad Barnowski

Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii
konrad.barnowski@student.uj.edu.pl

Chemik organik stale musi zmagać się z retrosyntetycznymi zagadkami. Przykładowo – w jaki sposób zsyntezować enancjomerycznie czysty związek, którego struktura została przedstawiona poniżej (**Rys.**)? Problem polega na tym, że w przeciwieństwie do codziennych zagadek, zagadki retrosyntetyczne posiadają wiele możliwych rozwiązań. Dotarcie do rozwiązania optymalnego prowadzi do zaoszczędzenia czasu syntezy i pieniędzy podatnika. Ponadto, zaprojektowanie odpowiedniej syntezy może zwiększyć jej zgodność z Zasadami Zielonej Chemii czy poprawić zdrowie psychiczne eksperymentatora (czyż prosta, 3-etapowa synteza nie brzmi zdrowiej od 10-etapowej pracy z łatwo rozkładającymi się produktami przejściowymi?).

W 1990 roku Nagrodę Nobla w dziedzinie chemii otrzymał Elias James Corey „za rozwój teorii i metodologii syntezy organicznej”^[1]. Pan Corey uważany jest tym samym za ojca analizy retrosyntetycznej.

Niniejsza praca przedstawia logikę i zasady analizy retrosyntetycznej, przedstawione przez Noblistę ponad 30 lat temu i nadal stosowane we współczesnej chemii organicznej^[2].



Rysunek Struktura jednej z potencjalnych zagadek chemika-syntetyka

¹ <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/1990/summary/> [dostęp: 10.03.2023].

² E. J. Corey, X.-M. Cheng, *The logic of chemical synthesis*; John Wiley & Sons, New York, 1989,1-96.

POLIMERY Z NADRUKIEM MOLEKULARNYM-MATERIAŁY O UNIKALNEJ WŁAŚCIWOŚCI SELEKTYWNEGO ROZPOZNAWANIA MOLEKULARNEGO

Natalia Bogdanowicz^{1,2}, Aleksandra Lusina¹, Tomasz Nazim¹, Michał Cegłowski¹

¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Chemii

²Naukowe Koło Chemików Wydziału Chemii UAM

nbogdanowicz592@gmail.com

Związki chlorofenolowe stosowane są na szeroką skalę do produkcji pestycydów, barwników lub jako same biocydy. Ich obecność można wykryć między innymi w wodzie. Występują w zanieczyszczeniach przemysłowych lub są wytwarzane poprzez rozkład bardziej złożonych cząsteczek. Wyniki badań pokazują, że chlorofenole są niebezpieczne dla organizmów żywych^[1].

Polimery wdrukowane molekularnie (MIP) to materiały, których działanie można porównać do relacji klucz-zamek. Posiadają specjalne wnęki, które kształtem, rozmiarem i obecnością poszczególnych grup funkcyjnych pasują selektywnie do tylko jednego wdrukowanego związku chemicznego. Skutkiem tego jest otrzymanie materiału, który bazując na oddziaływaniach powstających w procesie polimeryzacji jest w stanie rozpoznawać cząsteczkę matrycy. Materiały te wykorzystać można w katalizie, dostarczaniu leków, separacji i oczyszczaniu, chemio- i bioczuJNIkach czy sztucznych przeciwciałach^[2].

Badania sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki, Projekt OPUS 19, 2021/43/D/ST5/01190.

¹ J. Gao, L. Liu, X. Liu, H. Zhou, *Chemosphere*, (2008), 71(6), 1181-1187.

² N. Bogdanowicz, A. Lusina, T. Nazim, M. Cegłowski, *J. Hazard. Mater.* (2023), 450, 131068.

SYNTEZA METALOORGANICZNYCH POCHODNYCH INHIBITORÓW PUNKTÓW KONTROLNYCH UKŁADU ODPORNOŚCIOWEGO

Agnieszka Gołdon^{1,2}, Damian Plażuk¹, Christian Hartinger³, Anna Wieczorek-Błauż¹

¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej

²Studenckie Koło Naukowe Chemików „Orbital” Uniwersytetu Łódzkiego

³University of Auckland, School of Chemical Sciences

agnieszka.goldon@edu.uni.lodz.pl

Immunoterapia jest coraz częściej używanym rodzajem terapii w leczeniu nowotworów, mając na celu pobudzenie układu odpornościowego pacjentów onkologicznych, aby ich organizm był w stanie efektywniej wykorzystywać swoją naturalną zdolność do walki z atakującą chorobą. Hamowanie przeciwnowotworowej odpowiedzi immunologicznej organizmu, w postaci indukowanej apoptozy komórek poddanych czynnikom mutagennym, jest jednym z mechanizmów działania nowotworów. Przykładem takiego działania jest nadekspresja niektórych inhibitorów punktów kontrolnych, spośród których można wymienić indoloamino-2,3-dioxygenazę (IDO), pełniącą funkcję enzymu immunosupresyjnego w szlaku metabolizmu tryptofanu, degradując go do kinureny^[1]. Podniesione stężenie IDO jest charakterystyczne w przypadku guzów o słabym rokowaniu, dlatego też IDO jest obiecującym celem immunoterapii nowotworów^[2]. Jednym z wyzwań projektowania niskocząsteczkowych inhibitorów celujących w potencjalny cel, jakim jest IDO1, jest ich wysoka zdolność do inhibicji enzymu przy jednoczesnym zachowaniu wysokiej specyficzności. Wśród potencjalnych nowych strategii poszukiwania specyficznych i efektywnych inhibitorów, chemia biometaloorganiczna może dostarczyć nowych narzędzi. Koncepcja zamiany grupy fenylowej na np. ferrocenylową lub przyłączenie ferrocenu do związków aktywnych biologicznie może wprowadzić nie tylko potencjalnie nowy mechanizm działania związków, ale także może zwiększyć ich aktywność^[3]. W komunikacie przedstawione zostaną modyfikacje inhibitorów IDO fragmentem metaloorganicznym.

Badania finansowane z grantu IDUB Nr decyzji - 45/2021.

¹ K. M. Mahoney, P. D. Rennert, G. J. Freeman, *Nat. Rev.*, 2015, 14, 561.

² S. G. Awuah, Y-R. Zheng, P. M. Bruno, M. T. Hemann, S. J. Lippard, *J. Am. Chem. Soc.*, 2015, 137, 14854.

³ a) M. Patra, G. Gasser, *Nat. Rev., Chem.* 2017, 1, 0066, b) A. Wieczorek et al., *ACS Med. Chem. Lett.*, 2016, 7(6), 612–617.

OTRZYMYWANIE FLUOROWANYCH DIMERÓW CIEKŁOKRYSTALICZNYCH

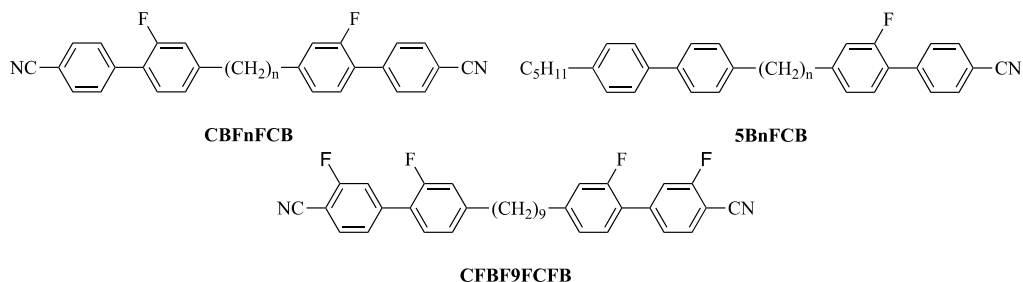
Jakub Karcz, Jakub Herman, Przemysław Kula

Wojskowa Akademia Techniczna, Wydział Nowych Technologii i Chemii
jakub.karcz@wat.edu.pl

Dimery ciekłokrystaliczne mogą tworzyć chiralne struktury, pomimo tego, że same zbudowane są z achiralnych molekuł^[1]. Takie zachowanie przewidziane było teoretycznie^[2], zakładając, że materiały o wygiętej budowie molekularnej mogą tworzyć helikoidalne struktury nematyczne. Po odkryciu fazy nematycznej twist-bend^[3], zsyntezowanych zostało wiele materiałów, w których obecność podstawników lateralnych silnie zależy od metody wprowadzania elastycznego łącznika do molekuly.

Bazując na klasycznej rodzinie dimerów CBnCB, zaprojektowano dwie ścieżki syntezy materiałów N_{TB} posiadających wewnętrzne pierścienie rdzeni ciekłokrystalicznych podstawione atomami fluoru. Metody te różnią się między sobą sposobem tworzenia wiązania pomiędzy rdzeniami a elastycznym łącznikiem. Pierwsza z nich wykorzystuje reakcję heterosprzęgania z użyciem odczynników Grignarda, w drugiej wiązanie C-C tworzone jest w reakcji S_N2 z jodem acetylenkowym. Ogólną budowę otrzymywanych dimerów przedstawiono na schemacie.

Na podstawie zaprojektowanych ścieżek syntezy otrzymano dziewięć molekuł bimezogenicznych: cztery z serii związków **CBFnFCB**, cztery z serii **5BnFCB** oraz jeden związek **CFBF9FCFB**. Związki te wykazują silny wpływ obecności atomów fluoru oraz długości łącznika oligometylenowego na właściwości ciekłokrystaliczne. Otrzymane związki, w porównaniu z serią CBnCB, charakteryzują się występowaniem fazy NTB w szerszym zakresie temperaturowym, a temperatury przemian fazowych uległy znacznemu obniżeniu.



Schemat Ogólna budowa otrzymywanych dimerów.

This work was financed/co-financed by Military University of Technology under research project UGB 22-801.

¹ R. J. Mandle, *Molecules* 2022, 27, 2689.

² I. Dozov, *Europhys. Lett.*, 2001, 56, 247.

³ M. Cestari et al., *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.* 2011, 84, 31704.

ADDYCJE FLUOROWANYCH NITRYLOIMIN DO DIPOLAROFILI C=C/C≡C

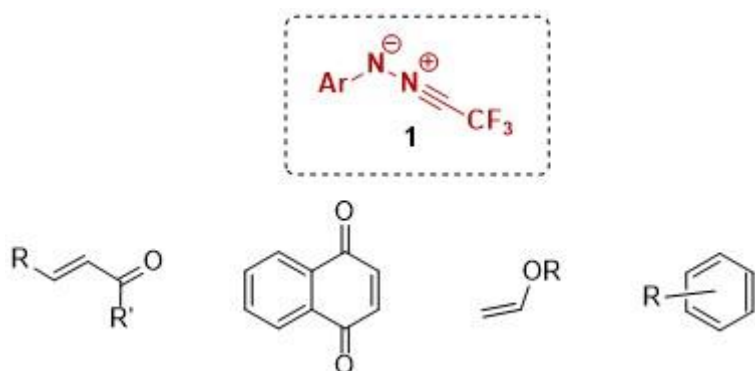
Anna Kowalczyk^{1,2}, Greta Utecht-Jarzyńska¹, Marcin Jasiński¹

¹ Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej i Stosowanej

² Uniwersytet Łódzki, Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych

anna.kowalczyk@edu.uni.lodz.pl

Iminy trifluoroacetonitrylu typu **1** są łatwo dostępnymi 1,3-dipolami generowanymi *in situ* w reakcji dehydrohalogenowania odpowiednich bromków hydrazonoilowych^[1]. Ze względu na ich wysoką reaktywność, stanowią wysoce użyteczną klasę reagentów do wykorzystania w syntezie fluorowanych heterocykli azotowych, w tym pochodnych istotnych z punktu widzenia zastosowań farmakologicznych i agrochemicznych^[2]. W komunikacie podsumowane zostaną wyniki naszych badań zorientowanych na wykorzystanie nitryloimin **1** w reakcjach (3+2)-cykloaddycji do wybranych dipolarofili C=C oraz C≡C, odpowiednio z grupy enonów, eterów winylowych oraz arynów.



Schemat Struktury imin trifluoroacetonitrylu **1** oraz przykładowych dipolarofili C=C i C≡C.

Badania zostały sfinansowane przez Uniwersytet Łódzki w ramach programu IDUB (grant no. 9/DGB/2022).

¹ G. Młostoń, K. Urbaniak, G. Utecht, D. Lentz, M. Jasiński, *J. Fluorine Chem.* 2016, 192, 147.

² (a) G. Utecht, A. Fruziński, M. Jasiński, *Org. Biomol. Chem.* 2018, 16, 1252-1257 (b) A. Kowalczyk, G. Utecht-Jarzyńska, G. Młostoń, M. Jasiński, *J. Fluorine Chem.* 2021, 241, 109691 (c) A. Kowalczyk, G. Utecht-Jarzyńska, G. Młostoń, M. Jasiński, *Org. Lett.* 2022, 24, 2499-2503 (d) G. Utecht-Jarzyńska, K. Nagła, G. Młostoń, H. Heimgartner, M. Plausiak, M. Jasiński, *Beilstein J. Org. Chem.*, 2021, 17, 1509-1517.

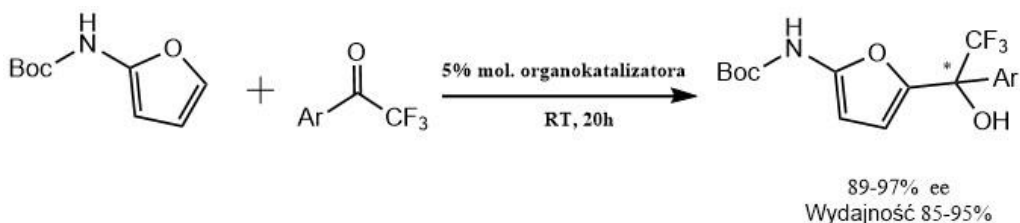
ENANCJOSELEKTYWNA ORGANOKATALITYCZNA ADDYCJA POCHODNEJ 2-AMINOFURANU DO KETONÓW TRIFLUOROMETYLOWYCH

Sebastian Macioszek, Joanna Częścik, Piotr Kwiatkowski

Wydział Chemii, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych, Uniwersytet Warszawski
sj.macioszek@student.uw.edu.pl

Ketony trifluorometylowe są ważnymi substratami wykorzystywanymi w syntezie asymetrycznej, w szczególności prowadzącej do chiralnych alkoholi z grupą CF₃ przy centrum stereogenicznym. Obecność tej grupy w cząsteczce może istotnie wpływać na jej właściwości chemiczne jak i aktywność biologiczną – np. grupę CF₃ można znaleźć w strukturach wielu współczesnych leków. Reakcje addycji różnych nukleofilów zachodzą dużo łatwiej do ketonów trifluorometylowych niż np. do acetofenonu.

Interesującym odczynnikiem o charakterze nukleofilowym jest N-Boc-2-aminofuran - reaktywna pochodna furanu, która właściwie nie była stosowana w reakcjach addycji do grupy karbonylowej oraz generalnie w procesach enancjoselektywnych. Reakcje tego typu mogą dostarczyć nowych interesujących bloków budulcowych w syntezie organicznej. Wstępne badania w tym temacie zostały przeprowadzone kilka lat temu w naszym laboratorium (J. Częścik). Moim celem było zgłębienie natury tej przemiany, jej optymalizacja oraz zaprezentowanie zakresu stosowalności.



Schemat badanej reakcji.

Skutecznymi organokatalizatorami tej reakcji okazały się chiralne aminosolnoki. Na plakacie zaprezentowany zostanie wpływ różnych czynników na przebieg i enancjoselektywność procesu, oraz zakres stosowanych ketonów trifluorometylowych. W wielu przypadkach udało się uzyskać wysokie wydajności oraz enancjoselektywności powyżej 90% ee. Kluczowy wpływ na możliwość wydajnego przebiegu tej reakcji ma obecność elektronodonorowej grupy -NH-Boc w strukturze furanu – dla przykładu jej zamiana na metyl (2-metylofuran) powoduje, że addycja już nie zachodzi.

KOMPLEKSY INKLUZYJNE CYKLODEKSTRYN

Bartosz Maliszewski, Paweł Misiak, Agnieszka Z. Wilczewska

Uniwersytet w Białymstoku, Wydział Chemii
bm78169@student.uwb.edu.pl

Cyklodekstryny, to związki nietoksyczne, pochodzenia naturalnego, stanowią rodzinę cyklicznych oligosacharydów^[1]. Zbudowane są z różnej ilości monomerów D-glukopiranozy połączonych ze sobą wiązaniami α -1,4-glikozydowymi^[2]. Najbardziej rozpowszechnione są te zbudowane z sześciu (α -cyklodekstryna), siedmiu (β -cyklodekstryna) i ośmiu (γ -cyklodekstryna) powtarzalnych jednostek D-glukopiranozy.

Jednostki D-glukopiranozy, które budują cyklodekstrynę, posiadają konformację krzesłową, co powoduje że przyjmuje ona kształt ściętego stożka, przypominającego torus. Atomy wodoru i tlenu wiązania glikozydowego są skierowane do środka wnęki, natomiast pierwszorzędowe (C-6) i drugorzędowe (C-2, C-3) grupy hydroksylowe skierowane są na zewnątrz cyklodekstryny. Tak charakterystyczna i nietypowa budowa, powoduje że wewnątrz cyklodekstryny jest hydrofobowe, natomiast zewnętrzna strona jest hydrofilowa. Dzięki obecności hydrofobowej wnęki, cyklodekstryna, może tworzyć kompleksy inkluzyjne.

Kompleksy inkluzyjne to niekowalencyjne oddziaływania typu „gość-gospodarz”^[3]. Podczas tworzenia kompleksu cząsteczka gościa (ligand) umieszczona zostaje we wnęcie cząsteczki gospodarza – cyklodekstryny. Tworzenie kompleksu zależy od takich czynników jak: kształt, wielkość i właściwości ligandu, oraz charakteru wzajemnych niekowalencyjnych oddziaływań „gość-gospodarz”. Istnieje szereg metod otrzymywania kompleksów inkluzyjnych m.in. współstrącanie, ugniatanie (metoda pasty), czy stosowanie dwutlenku węgla w stanie nadkrytycznym, mechanochemii, promieniowania mikrofalowego oraz suszenia rozpyłowego. Tworzenie kompleksów wpływa na poprawę właściwości fizykochemicznych i biodostępność gościa. Pozwala to na szerokie wykorzystanie w przemyśle: farmaceutycznym, kosmetycznym czy spożywcym^[4].

Podziękowania: Projekt został sfinansowany ze środków NCN, grant PRELDUIUM nr 2020/37/N/ST5/02140.

¹ T. Loftsson, *J. Pharm. Sci.*, 2021, 110, 654–664.

² M.A. Przybyła, G. Yilmaz, C.R. Becer, *Polym. Chem.*, 2020, 11, 7582–7602.

³ B. Ding, Y. Yu, S. Geng, B. Liu, Y. Hao, G. Liang, *J. Agric. Food Chem.*, 2022, 70, 2466–2482.

⁴ A. Cid-Samamed, J. Rakmai, J.C. Mejuto, J. Simal-Gandara, G. Astray, *Food Chem.*, 2022, 384, 132467.

SYNTEZA POCHODNYCH ALDEHYDU SALICYLOWEGO JAKO LUMINESCENCYJNYCH MATERIAŁÓW DLA ELEKTRONIKI ORGANICZNEJ

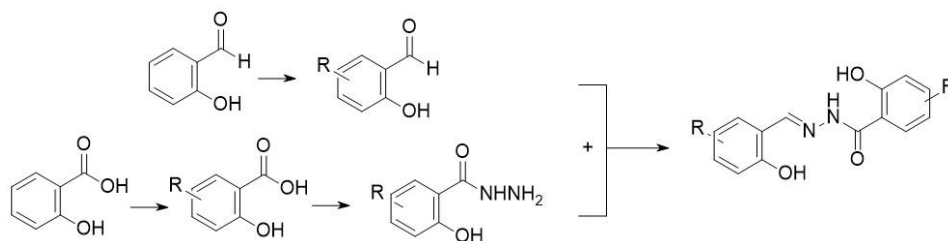
Lena Marciniak^{1,2}, Adam Marek Pieczonka², Michał Rachwański²

¹Uniwersytet Łódzki, Szkoła Doktorska BioMedChem Uniwersytetu Łódzkiego i Instytutów Polskiej Akademii Nauk w Łodzi

²Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej i Stosowanej
lena.marciniak@edu.uni.lodz.pl

Luminescencyjne związki organiczne cieszą się dużym zainteresowaniem w dziedzinie chemii, głównie pod kątem wykorzystania w elektronice organicznej. Fluorescencyjne układy organiczne powinny posiadać odpowiednie właściwości, aby mogły znaleźć zastosowanie w najbardziej innowacyjnych urządzeniach, np. organicznych diodach elektroluminescencyjnych OLED (*ang.* Organic Light Emitting Diode). Duży potencjał aplikacyjny posiadają motywy organiczne otrzymane na drodze sprzężenia krzyżowego, np. Suzuki-Miaury lub Sonogashiry. Sprzężone układy aromatyczne stanowią podstawowy budulec wielu związków organicznych wykorzystywanych w urządzeniach elektroniki organicznej^[1,2].

Celem badań była synteza nowych, luminescencyjnych pochodnych aldehydu salicylowego, których właściwości pozwolą na potencjalne wykorzystanie ich w elektronice organicznej. Ważną kwestią było zatem wytworzenie odpowiednich luminescencyjnych materiałów aby otrzymać cienkie, jednolite warstwy ciała stałego. Warstwy takie mogą zostać wykorzystane np. jako warstwy emisyjne w organicznych diodach elektroluminescencyjnych OLED.



Schemat Ścieżka syntezy hydrazonów hydrazydowych.

¹ Y. Nishihara, M. Kinoshita, K. Hyodo, Y. Okuda, R. Eguchi, H. Goto, S. Hamao, Y. Takabayashi, Y. Kubozono, *RSC Adv.*, 2013, 3, 19341-19347.

² J. F. Huang, J. M. Liu, L. L. Tan, Y. F. Chen, Y. Shen, L. M. Xiao, D. B. Kuang, C. Y. Su, *Dyes and Pigments*, 2015, 114, 18-23.

SYNTEZA I STRUKTURA PIĘCIOCZŁONOWYCH LAKTONÓW ZAWIERAJĄCYCH GRUPĘ TRIFLUOROMETYLOWĄ

Wiktoria Moćko¹, Magdalena Kwiatkowska¹, Maciej Hodorowicz², Alicja Wzorek¹

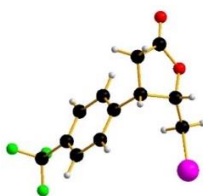
¹Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Instytut Chemii

²Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii

wika.moćko@vp.pl

Laktony stanowią interesującą klasę związków organicznych, które ogólnie można definiować jako cykliczne estry. Laktony są szeroko rozpowszechnione w świecie roślin i zwierząt, gdzie pełnią różnorodne funkcje^[1]. Zainteresowanie naturalnymi laktonami wynika z szeregu ich użytecznych właściwości, dzięki którym znajdują zastosowanie w wielu gałęziach przemysłu. Wiele laktonów wykazuje aktywność biologiczną w stosunku do komórek bakterii, komórek rakowych, wirusów czy grzybów. Wiele z nich posiada aktywność deterentną w stosunku do szkodników zbożowych, co powoduje, że mogą znaleźć zastosowanie jako łatwo biodegradowalne środki ochrony roślin^[2].

Biorąc pod uwagę wysoką aktywność związków posiadających atomy fluoru interesująca staje się synteza i badania nad połączeniami posiadającymi zarówno ugrupowanie laktonowe jak i atomy fluoru w swojej strukturze.



Rysunek Struktura krystaliczna cis gamma-jodolaktonu

Na posterze zaprezentowana zostanie metoda syntezy pięcioczłonowych laktonów, zawierających grupy trifluorometylowe w pierścieniu aromatycznym, ich analiza spektralna i struktura x-ray, które pozwoliły na ustalenie ich budowy.

Otrzymane laktony zostaną poddane w dalszym etapie badaniom w kierunku aktywności bateryjnej.

Podziękowania za dofinansowanie dla Pani Prorektor ds. Kształcenia dr hab. inż. Barbara Gawdzik, prof. UJK za umożliwienie aktywizacji naukowej.

¹ C. Formisano, C. Sanna, M. Ballero, G. Chianese, C. Sirignano, D. Rigano, E. Millan, E. Munoz, O. Tagliatela-Scafati, *Fitoterapia*, 2017, 116, 61-65.

² A. Hartman, *Rhizosphere*, 2020, 16, 100258.

CIEKŁOKRYSTALICZNE PRZESTRAJALNE MATERIAŁY EMISYJNE

Natan Rychłowicz¹, Marcin Muszyński², Jacek Szczytko², Wiktor Piecek¹, Przemysław Kula¹

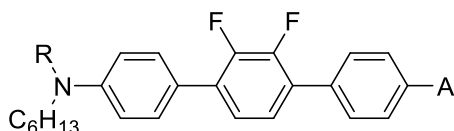
¹Wojskowa Akademia Techniczna, Wydział Nowych Technologii i Chemii

²Uniwersytet Warszawski, Wydział Fizyki

natan.rychlowicz@wat.edu.pl

Materiały ciekłokrystaliczne, charakteryzujące się wysokim uporządkowaniem i przestrajalnością, są medium optycznym dającym kontrolę nad wieloma parametrami urządzenia optycznego. Dodanie emiterów o anizotropowym kształcie do materiału ciekłokrystalicznego pozwala na uzyskanie fotoluminescencyjnych mieszanin ciekłokrystalicznych, w których możliwe jest kontrolowanie m.in. polaryzacji światła emitowanego oraz intensywności emisji^[1,2].

W ramach badań zsyntezowano szereg emiterów typu push-pull, zawierających jako donor grupę N,N-dialkiloaminową i różne grupy akceptorowe. Zbadano właściwości mezomorficzne, emisyjne, rozpuszczalność w mieszaninach bazowych, a także wykonano obliczenia teoretyczne. Zaprojektowano mieszaniny zawierające emitery oraz zbadano polaryzację światła emitowanego, a także intensywność emisji dla różnych wartości napięcia w komórce ciekłokrystalicznej. Uzyskane emitery charakteryzują się wysoką wydajnością kwantową luminescencji, a także wysoką rozpuszczalnością w bazowych mieszaninach ciekłokrystalicznych. Materiały pozwalają na uzyskanie materiałów ciekłokrystalicznych charakteryzujących się wysokimi wartościami współczynnika dichroicznego, a także możliwością kontroli intensywności emisji.



R = C₆H₁₃, CH₃ A - grupa akceptorowa

Schemat Wzór ogólny emiterów

Praca powstała w wyniku realizacji projektu badawczego o nr. UMO- 2019/33/B/ST5/02658 finansowanego ze środków Narodowego Centrum Nauki.

This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 FET Open research and innovation action under the grant agreement No. 964770 (TopoLight).

¹ Y. Wang et al., *J. Mater. Chem.*, 2015, 3, 7993-8005.

² Y. Li et al., *Opt. Express*, 2018, 26, 23000-23007.

WALORYZACJA ODPADÓW PRZEMYSŁU SPOŻYWCZEGO/BROWARNICZEGO W KIERUNKU OTRZYMANIA FUNKCJONALNYCH MATERIAŁÓW WĘGLOWYCH

Natalia Siodłak, Agnieszka Kicińska, Daniel Biegun, Rafał Bąk, Alina Brzęczek-Szafran, Anna Chrobok

Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny
nataliasiodlak@gmail.com

Rosnące zapotrzebowanie na energię elektryczną i jednocześnie jej niedobory, intensyfikuje badania nad technologiami wykorzystującymi odnawialne źródła energii. Materiały węglowe, które można wykorzystać jako elektrody w rozwiązaniach elektrochemicznych, mogą przyczynić się do poprawy dostępności technologii, pozwalających na wydajną i ekonomiczną konwersję i magazynowanie energii z wykorzystaniem elektrokatalizy. Atrakcyjną alternatywą dla konwencjonalnych paliw kopalnych wykorzystywanych do otrzymania funkcjonalnych materiałów węglowych, stało się wykorzystanie biomasy. Tradycyjnie materiały węglowe pochodzące z biomasy wytwarza się z biomasy stałej, co może ograniczać ich funkcjonalność ze względu na słabą kontrolę morfologii, nierówne domieszkowanie heteroatomami i ograniczoną wytrzymałość.

Celem przeprowadzonych badań było zidentyfikowanie szeroko dostępnej biomasy, ze szczególnym uwzględnieniem lokalnych odpadów przemysłu rolno-spożywczego oraz opracowanie drogi jej transformacji w funkcjonalne materiały węglowe^[1].

Jako atrakcyjne źródło biomasy wybrano odpady pochodzenia browarniczego^[2], z powodu wielkotonażowej produkcji piwa w Polsce oraz łupiny orzechów, pochodzące z zakładów produkujących mieszanki bakalii. W ramach przeprowadzonych badań, wybrane odpady rozpuszczono w mieszaninach głęboko eutektycznych (DES)^[3], celem otrzymania upłynnionej biomasy. Aby to osiągnąć, wykorzystano DESy na bazie chlorku choliny i mocznika, chlorku choliny i kwasu szczawiowego, chlorku cynku i mocznika oraz histydyny i kwasu mlekowego. W kolejnym kroku upłynnioną biomasę poddano hydrotermalnej karbonizacji, otrzymując materiały węglowe. Pozytywne efekty wstępnych prób przekształcania upłynnionej biomasy w materiały węglowe stwarzają potencjał do rozwoju dalszych badań i doskonalenia opracowanych rozwiązań.

Autorzy dziękują Politechnice Śląskiej za udzielone wsparcie finansowe w ramach projektu PBL "Waloryzacja odpadów przemysłu spożywczego/browarniczego w kierunku otrzymywania funkcjonalnych materiałów węglowych" 31/010/SDU20/000610.

¹ P. Lai, H. Zhou, Z. Niu, L. Li, W. Zhu, L. Dai, *Chem. Eng. J.*, 2023, 457.

² S. Cailotto, D. Massari, M. Gigli, C. Campalani, M. Bonini, et al. *ACS Omega*, 2022, 7 (5), 4052-4061.

³ B. Hansen, S. Spittle. B. Chen, D. Poe, Y. Zhang, et al., *Chem. Rev.*, 2021, 121, (3), 1232–1285.

CHIRALNE KOMPLEKSY AU(I) Z KARBENAMI GENEROWANYMI Z SOLI IMIDAZOLIOWYCH

Adrian Warcholiński^{1,2}, Emilia Objalska¹, Grzegorz Mlostoń¹

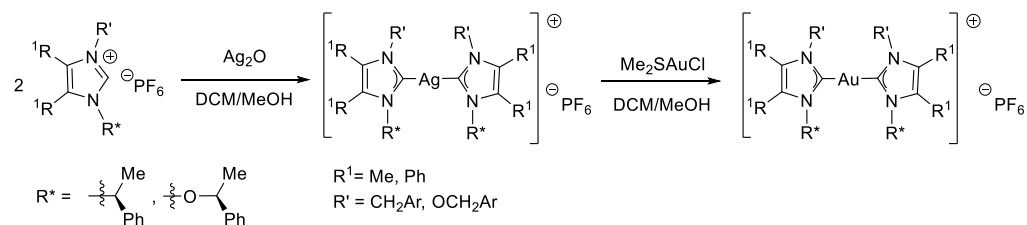
¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej i Stosowanej

²Uniwersytet Łódzki, Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych

adrian.warcholinski@edu.uni.lodz.pl

Otrzymywanie kompleksów metali przejściowych stanowi ciekawy obiekt badań krystalografii i chemii koordynacyjnej. Szczególnie interesująca jest synteza oraz badanie właściwości nowych kompleksów nukleofilowych karbenów (NHCs) z metalami bloku d, które wykazują potencjalne działanie przeciwnowotworowe, bakteriobójcze oraz wspomagające terapię nowotworową^[1].

Celem naukowym projektu było otrzymywanie nowych, enancjomerycznie czystych kompleksów karbenów ze złotem. W ramach prac przeprowadzono syntezy związków docelowych przez traktowanie odpowiedniej soli imidazoliowej tlenkiem srebra oraz w kolejnym etapie (Me)₂SAuCl (**Rysunek**)^[2]. W zależności od struktury użytej soli, kompleksy będą zbudowane z karbenów posiadających podstawniki alkilowe bądź alkoksylowe.



Rysunek. Schemat syntezy kompleksów Au(I) z karbenami generowanymi z chiralnych soli imidazoliowych.

Praca sfinansowana przez Uniwersytet Łódzki ze środków przyznanych w ramach Studenckich Grantów Badawczych UŁ 2022.

¹ W. J. Youngs, A. R. Knapp, P. O. Wagersa, C. A. Tessier, *Dalton Trans.*, 2012, 41, 327-336.

² D. Curran, H. Müller-Bunz, S. I. Bär, R. Schobert, X. Zhu, M. Tacke, *Molecules*, 2020, 25, 3474.

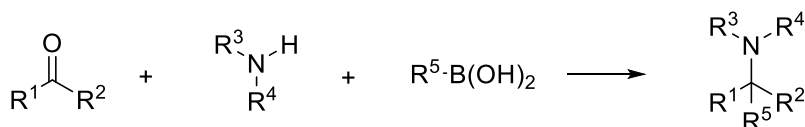
SYNTEZA CHIRALNYCH MORFOLINONÓW

Agata Warlich, Agnieszka Grajewska

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Medycznej
agawar1@st.amu.edu.pl

Morfoliny to ważna klasa związków heterocyklicznych, która jest obecna w strukturach wielu cząsteczek wykazujących szerokie spektrum aktywności. Przykładowo, znane są związki, które działają jako blokery kanałów wapniowych^[1,2], przeciwnowotworowo^[3], czy są inhibitorem proteazy wirusa HIV^[4]. Morfoliny są również stosowane w syntezie organicznej^[5].

Reakcja Petasisa-Mannicha (Schemat) to reakcja trójskładnikowa zachodząca między związkiem karbonylowym, aminą i kwasem organoboronowym. Stanowi ona dogodną metodę syntezy produktów zawierających atom azotu, m.in. aminokwasów, aminoalkoholi, amin, aminocukrów jak również szerokiego spektrum związków heterocyklicznych^[6].



Schemat Reakcja Petasisa-Mannicha.

W wystąpieniu omówione zostaną wyniki badań związanych z wykorzystaniem reakcji Petasisa w stereoselektywnej syntezie wielopodstawionych morfolinonów z zastosowaniem chiralnych modyfikowanych aminoalkoholi^[7] i aminodioli jako substratów.

Badania finansowane w ramach programu Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza, projekt nr 049/34/ID-UB/0036.

¹ U. Trstenjak, J. Ilaš i D. Kikelj, *Synthesis*, 2012, 44, 3551–3578.

² W. Ku, S. Cho, M. R. Doddareddy, M. S. Jang, G. Keum, J.-H. Lee, B. Y. Chung, Y. Kim, H. Rhim i S. B. Kang, *Bioorganic Med. Chem. Lett.*, 2006, 16, 5244–5248.

³ J. N. Mock, J. P. Taliaferro, X. Lu, S. K. Patel, B. S. Cummings i T. E. Long, *Bioorganic Med. Chem. Lett.*, 2012, 22, 4854–4858.

⁴ W. M. Kazmierski, E. Furfine, A. Spaltenstein i L. L. Wright, *Bioorganic Med. Chem. Lett.*, 2006, 16, 5226–5230.

⁵ M. M. Zhao, J. M. McNamara, G.-J. Ho, K. M. Emerson, Z. J. Song, D. M. Tschäen, K. M. J. Brands, U.-H. Dolling, E. J. J. Grabowski i P. J. Reider, *J. Org. Chem.*, 2002, 67, pp. 6743–6747.

⁶ P. Wu, M. Givskov i T. E. Nielsen, *Chem. Rev.*, 2019, 119, p. 11245–1290.

⁷ A. Grajewska, M. D. Rozwadowska i A. Gzella, *J. Mol. Struct.*, 2019, 1194, pp. 204–210.

PROCES HYDROSILILOWANIA JAKO NAJBARDZIEJ UNIWERSALNA METODA SYNTEZY ZWIĄZKÓW KRZEMOORGANICZNYCH

Joanna Wojtukiewicz^{1,2}, Kinga Stefanowska², Jędrzej Walkowiak²

¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii,

²Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Centrum Zaawansowanych Technologii,
joawoj19@st.amu.edu.pl

Reakcja hydrosylilowania jest jedną z najprostszych oraz najbardziej wydajnych metod syntezy związków krzemorganicznych^[1,2]. Zaletami tej reakcji są m.in. 100% atomowa ekonomia procesu, możliwość prowadzenia reakcji w atmosferze powietrza, w szerokim zakresie temperatur, z zastosowaniem komercyjnie dostępnych reagentów oraz katalizatorów odpornych na obecność w strukturach substratów reaktywnych grup funkcyjnych.

Poprzez odpowiedni dobór katalizatora, reagentów oraz warunków prowadzenia reakcji możliwa jest wysoce selektywna i wydajna synteza wszystkich izomerów związków powstałych w wyniku addycji połączenia Si-H do wiązania wielokrotnego węgiel-węgiel, węgiel-heteroatom, heteroatom-heteroatom.

Dodatkowo zastąpienie powszechnie stosowanych rozpuszczalników organicznych „zielonymi” rozpuszczalnikami takimi jak: CO₂ w stanie nadkrytycznym^[3], ciecze jonowe (IL)^[4] czy poliglikole (PEG)^[5], czyni proces niezwykle unikalnym oraz wpisującym się w założenia „Zielonej Chemii”.

W niniejszym komunikacie zaprezentuję możliwości i zastosowanie procesu hydrosylilowania w kontekście syntezy związków krzemorganicznych. Omówione zostaną zalety zastosowania „zielonych” rozpuszczalników oraz wpływ warunków prowadzenia procesu na jego selektywność oraz wydajność.

¹ B. Marciniak, H. Maciejewski, C. Pietraszuk, P. Pawluć, *Hydrosilylation and related reactions of silicon compounds*, [w:] B. Cornils, W.A Herrmann, M. Beller, R. Paciello, *Applied Homogeneous Catalysis with Organometallic Compounds: A Comprehensive Handbook in Four Volumes*, Wiley, 2017, 569-620.

² B. Marciniak (Ed.), *Hydrosilylation. Advances In Silicon Science*, Springer, Berlin, 2009.

³ K. Stefanowska, A. Franczyk, J. Szyling, K. Salamon, B. Marciniak, J. Walkowiak, *J. Catal.*, 2017, 356, 206-213.

⁴ H. Maciejewski, K. Szubert, B. Marciniak, J. Pernak, *Green Chem.*, 2009, 11, 1045.

⁵ Wu Ch., Peng J., Li J., Bai Y., Hu Y., Lai G., *Cat. Commun.*, 2008, 10, 248 – 250.

PRZEŁĄCZNIKI MOLEKULARNE – SYNTEZA I ZASTOSOWANIE

Damian Zarzecki, Izabella Jastrzębska

Uniwersytet w Białymstoku, Wydział Chemii
dz78211@student.uwb.edu.pl

Przełączniki molekularne (PM) to jeden z wielu przykładów próby naśladowania systemów funkcjonujących w organizmach żywych. Poznanych jest szereg naturalnie występujących PM, jak i tych otrzymanych na drodze syntezy chemicznej.

Przełącznikami molekularnymi nazywamy cząsteczki, w których możliwe jest odwracalne przejście pomiędzy dwoma stanami stabilnymi termodynamicznie. Przejścia te mogą być wywoływane przez bodźce zewnętrzne tj.: promieniowanie elektromagnetyczne UV-Vis, prąd elektryczny, zmiany temperatury, zmiany pH, zmiany potencjału redoks oraz inne substancje chemiczne^[1]. Przejście pomiędzy tymi stanami może zachodzić poprzez zmianę konformacji, orientacji dipoli oraz tworzenie wiązań chemicznych^[2].

PM stosuje się do modyfikacji powierzchni m. in.: cienkich filmów, nanocząstek oraz powierzchni elektrod zmieniając ich przewodność^[3]. Wykorzystując przełączniki molekularne można tworzyć nanoobiekty np. światłoczułe nanoprobówki. Jednym z możliwych zastosowań światłoczułych PM jest fotofarmakologia. Z wykorzystaniem PM jest możliwe wprowadzenie substancji czynnych w formie nieaktywnej i decydowanie o momencie ich aktywacji poprzez zmianę stanu termodynamicznego danego PM^[1].

¹ B. Feringa, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2017, 56, 11060 – 11078.

² J. Zhag, *Chem. Soc. Rev.*, 2015, 44, 2998-3022.

³ J. Steen, *Surf. Sci. Rep.*, Article in press.



**CHEMIA POLIMERÓW
I PRZEMYSŁOWA**

NATURALNE FOLIE BIODEGRADOWALNE Z CHITOZANU WZMOCNIONE NANOCELULOZĄ

Michał Nowotarski¹, Weronika Janik^{2,3}, Gabriela Dudek¹

¹ Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów

² Sieć Badawcza Łukasiewicz - Instytut Ciężkiej Syntezy Organicznej „Blachownia”

³ Politechnika Śląska, Wspólna Szkoła Doktorska, Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów
michnow566@student.polsl.pl

W pracy przedstawiono wyniki badań dotyczących wpływu nanocelulozy, dodawanej do matrycy chitozanowej na właściwości mechaniczne, barierowe oraz fizykochemiczne folii biodegradowalnych. Do badań zostały wybrane trzy rodzaje nanocelulozy dostępnej komercyjnie tj. krystaliczna, krystaliczna w dyspersji oraz w postaci nanowłókien. Dodatkowo, w roli substancji bakteriobójczej zastosowano ekstrakt z kasztanowca.

Zalegające na wysypiskach śmieci oraz na dnie mórz i oceanów folie z polimerów sztucznych zanieczyszczają środowisko naturalne i przyczyniają się do zmian w ekosystemie. W związku z tym, w 2019 roku Parlament Europejski zatwierdził dyrektywę plastikową, zgodnie z którą zabroniona jest sprzedaż opakowań z tworzyw sztucznych. Aby sprostać tej dyrektywie poszukuje się alternatywnych materiałów. Takimi materiałami są polimery naturalnie występujące w środowisku. Wśród nich chitozan cieszy się dużą popularnością.

Przeprowadzone badania wskazują, że zarówno rodzaj jak i stężenie nanocelulozy wpływają znacząco na właściwości mechaniczne otrzymanej folii. Porównując folie wypełnione nanocelulozą w postaci krystalicznej lub nanowłókien z foliami bez wypełnienia obserwuje się wzrost wytrzymałości na rozciąganie. Najlepsze właściwości mechaniczne wykazała folia zawierająca nanocelulozę w postaci nanowłókien o stężeniu 0,5% wag, dla której otrzymana wartość wynosi 92 MPa, i jest o 34% większa w porównaniu z folią niezawierającą wypełnienia. Rozważając parametry wytrzymałościowe w odniesieniu do ilości dodawanej nanocelulozy można zauważyć, że wytrzymałość na rozciąganie ulega pogorszeniu wraz ze wzrostem ilości wypełnienia do 5%wag. nanocelulozy. Powyżej tego stężenia obserwuje się ponowną poprawę tego parametru. Analizując właściwości fizykochemiczne oraz barierowe otrzymanych folii można stwierdzić, że wypełnienie w postaci nanocelulozy nie wpływa znacząco na zmianę ich wartości w porównaniu z folią bez wypełnienia^[1].

Podsumowując, dodanie nanocelulozy do matrycy z chitozanu wpływa znacząco na poprawę właściwości mechanicznych otrzymanych folii przy równoczesnych zachowaniu korzystnych pozostałych właściwości.

Badania zostały przeprowadzone w ramach projektu PBL finansowanego przez Politechnikę Śląską.

¹ W. Janik, *Carbohydr. Polym.*, 2023, 301, 1-14.

BADANIE PRZESIEWOWE KATALIZATORÓW DO SYNTEZY BIS(3,5,5-TRIMETYLOHEKSAN-1-OLU) Z ODPADOWEGO POLI(TEREFTALANU ETYLU)

Mateusz Zygałło¹, Marcin Muszyński^{2,3}, Agata Krasuska², Janusz Nowicki², Gabriela Dudek¹

¹Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów

²Sieć Badawcza Łukasiewicz Instytut Ciężkiej Syntezy Organicznej „Błachownia”

³Politechnika Śląska, Wspólna Szkoła Doktorska, Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów
matezyg797@student.polsl.pl

Celem przeprowadzonych badań było wytypowanie aktywnych układów katalitycznych w reakcji alkoholizy poli(tereftalanu etylenu) (PET) do wytwarzania tereftalanu bis(3,5,5-trimetyloheksan-1-olu) (TFBTMH).

W ostatnich latach ogromnym problemem dla środowiska naturalnego stały się odpady z tworzyw sztucznych. Ich roczna produkcja sięga setek milionów ton, z czego tylko około 40% poddaje się recyklingowi lub utylizacji. Jedną z powszechnie stosowanych metod utylizacji tworzyw sztucznych jest ich spalanie. Metoda ta jednak wiąże się z koniecznością wykorzystania wysoce wydajnych filtrów spalin oraz wydzielaniem tlenku węgla (IV) do atmosfery. Inną, obiecującą metodę utylizacji odpadów tego typu stanowi proces depolimeryzacji lub alkoholizy, czyli depolimeryzacji połączonej z jednoczesną syntezą nowego związku. Dzięki temu procesowi możliwe jest otrzymanie plastyfikatora z odpadowego PET co skutkuje możliwością zmniejszenia produkcji kwasu tereftalowego, powszechnie używanego do syntezy plastyfikatorów dla poli(chlorku winylu) (PCW)^[1].

W niniejszej pracy, w celu utylizacji odpadowego PET, zastosowano proces alkoholizy, sprawdzając aktywność 10 katalizatorów z grup: superzasady, związki metaloorganiczne, zasady oraz ciecze jonowe. Badania prowadzono w reaktorze, w atmosferze azotu przez 6 godzin. Po przeprowadzonym procesie mieszaninę reakcyjną poddano analizie chromatograficznej w celu wytypowania najefektywniejszych układów katalitycznych. Ponadto przeprowadzono badania plastyfikujące uzyskanego TFBTMH.

Na podstawie otrzymanych wyników, stwierdzono, że właściwości plastyfikujące otrzymanego TFBTMH są zadowalające i porównywalne do właściwości komercyjnie dostępnego ftalanu diizononylu. Spośród przebadanych związków najbardziej obiecujące okazały się tetrabutylotytanian oraz 2-etyloheksanian cyny(II).

Badania zostały przeprowadzone w ramach projektów: Studenckie Koła Naukowe Tworzą Innowacje o numerze SKN/SP/535370/2022 finansowanego przez Ministerstwo Edukacji i Nauki oraz PBL i SKN o numerze 31/010/SDU20/0006-10 finansowanego przez Politechnikę Śląską.

¹ Geyer R, Jambeck JR, Law KL. *Sci. Adv.*, 2017, 7, Tom3:e1700782.



**KOMUNIKATY POSTEROWE
(POPULARNONAUKOWE)**

NIEBANALNE NARZĘDZIE ZBRODNI – CHEMICZNE SPOSOBY NA MORDERSTWO DOSKONAŁE

Julia Hilarowicz

Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii
julia.hilarowicz@student.uj.edu.pl

Od zarania dziejów wiele można było usłyszeć o historiach związanych z trucicielami. Ludzie zbierający zioła na polanach z czasem zaczęli zdawać sobie sprawę z tego, że ich zbiory nie służą tylko do uzdrowienia człowieka, lecz można je wykorzystać do skutecznego odebrania życia.

Toksykologia jest nauką zajmującą się między innymi truciznami. Słowo trucizna wywołuje wiele negatywnych skojarzeń, ale czym tak naprawdę jest? Najczęściej określana była jako „substancja chemiczna”. W różnych źródłach możemy znaleźć setki podobnych do siebie definicji, np. „substancja, która wprowadzona do żywych organizmów lub absorbowana przez nie, powoduje ich śmierć lub uszkodzenie, w szczególności taka substancja, która nawet w małej dawce powoduje bardzo szybką śmierć”. Inna definicja wspomina, że jest to „każda substancja, która - wprowadzona do organizmu albo w nim powstająca – niszczy życie lub osłabia zdrowie”^[1].

Wraz z wzrostem popularności trucizn ludzie zaczęli się obawiać o swoje zdrowie i z tego powodu stawali się coraz bardziej ostrożni. Truciciele szukali więc, rozmaitych sposobów na wykonanie zbrodni doskonałej. Odnotowano wiele przypadków dodatku trucizny do produktów codziennego użytku. Katarzyna Medycejska w XVI wieku testowała toksyczne objawy różnych mieszanin podając je ubogim ludziom w pożywieniu. Kolejną kobietą, która potrafiła wykorzystać właściwości trucizn była Lucrezia Borgia, która posiadała pierścień, z którego dosypywała trucizny do napoi. W Anglii w XIX wieku matka, aby otruć swoje dziecko, dosypała do pudru arseniku. Uważa się, że został on również wykorzystany do zabicia rzymskiego cesarza Klaudiusza przez własną żonę.

Liczne historie z przeszłości mogą jedynie utwierdzić ludzki strach przed wykorzystaniem trucizny. Kiedyś ich zastosowanie było kojarzone z alchemią lub magią, jednak w obecnych czasach ta sztuka nie zatarła się i nie wyszła z mody.

¹ J. Timbrell, *Paradoks trucizn*, 2005r.

GLUKOZYLACJA TERPENÓW JAKO ELEMENT FUNKCJONALIZACJI ZWIĄZKÓW W KIERUNKU TWORZENIA PROLEKÓW

Oktawia Korcz, Jarosław Popłoński

Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności
oktawia.korcz@gmail.com

Tymol i karwakrol są głównymi bioaktywnymi izomerami, które występują w olejkach eterycznych ziół takich jak tymianek, czy oregano należących do roślin z rodziny *Lamiaceae*^[1]. Związki te posiadają właściwości antybakteryjne wobec bakterii gram-dodatnich i gram-ujemnych. Opisujący mechanizm ich działania polega na destabilizacji i rozerwaniu błony komórkowej bakterii, co prowadzi do lizy komórki oraz zahamowaniu aktywności pomp błonowych (w tym ATPaz), co skutkuje redukcją tworzenia się biofilmów i ograniczeniu w ruchliwości bakterii^[2].

Możliwość zastosowania przedstawionego monoterpenu oraz jego glukokoniugatów została opisana na modelu zwierzęcym w celu ograniczenia stosowania antybiotyków w produkcji zwierzęcej. Tymol szybko wchłania się w górnych odcinkach przewodu pokarmowego, co sprawia, że odpowiednie stężenia badanych terpenów nie docierają do miejsca docelowego – dystalnych części przewodu pokarmowego. Glukozyłacja zmniejsza lotność aglikonu oraz maskuje ostry smak, co jest korzystne podczas stosowania tego związku w paszach. Dodatkowo glukozydy zmieniają rozpuszczalność wtórnych metabolitów roślinnych oraz modyfikują ich aktywność biologiczną. Funkcjonalność glukozydów zależy od uwalniania aktywnego aglikonu w miejscu docelowym przez enzymy hydrolizujące^[3].

Cena rynkowa glukozydów tymolu i karwakrolu wynosi ok. 7 268 €/g związku. Celem badań było wykorzystanie kaskady genetycznej składającej się z glukozylotransferazy YjiC z *Bacillus licheniformis* oraz syntazy sacharozy z *Glycine max* w celu katalizowania reakcji glukozyłacji tymolu oraz karwakrolu *in vitro* z możliwością odtworzenia drogich cukrów nukleotydowych, będącymi donorami glukozy podczas reakcji. Dzięki zastosowanemu podejściu, które obejmuje immobilizację i jednoetapowe oczyszczanie, udało się uzyskać pożądane glukozydy w skali preparatywnej.

¹ S. Kokkini i wsp., *J. Essent. Oil Res.*, 16.4 (2004): 334-338.

² K. Kachur i wsp., *Crit. Rev Food Sci. Nutr.*, 60.18 (2020): 3042-3053.

³ V. Noten i wsp., *ACS Omega*, 5.10 (2020): 5241-5248.

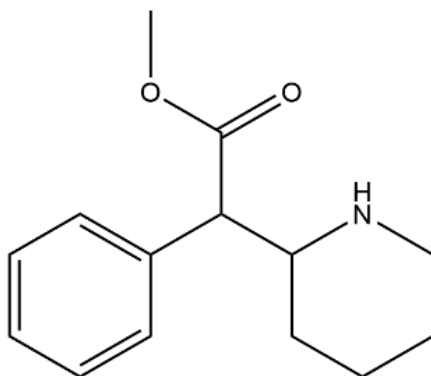
METYLOFENIDAT – WYKORZYSTANIE W FARMAKOTERAPII ADHD

Tymoteusz Kunert

Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii
t.kunert@student.uj.edu.pl

Zespół nadpobudliwości psychoruchowej z deficytem uwagi (ADHD) jest zespołem neurorozwojowych zaburzeń psychicznych, diagnozowanym zarówno u dzieci, jak i u osób dorosłych. Wśród najczęstszych objawów znajdują się nadpobudliwość ruchowa, impulsywność i niemożność utrzymania koncentracji, niesie też ze sobą wiele chorób współistniejących^[1].

Jednym z leków stosowanych do farmakoterapii ADHD, jak również dopuszczonych do sprzedaży na rynku Polskim jest metylofenidat. Jego działania opiera się na blokowaniu zależnych od jonów sodowych transporterów dopaminy (DAT) i transporterów noradrenaliny (NET), regulując tym samym zaburzoną ilość neuroprzekaźników w szczelinach synaptycznych w korze przedczołowej mózgu. Wykazuje również działanie psychostymulujące, co poprawia zdolność utrzymania koncentracji u osób objętych leczeniem^[2,3].



Rysunek Wzór strukturalny metylofenidatu (2-fenyl-2-(piperdyn-2-ylo)octanu metylu)

¹ J. Quintero, J. R. Gutiérrez-Casares, C. Álamo, *Neurol. Ther.*, 2022, 11, 1489–1517.

² C. J. Wenthur, *ACS Chem. Neurosci.*, 2016, 7, 1030–1040.

³ P. Seeman, B. K. Madras, *Mol. Psychiatry*, 1998, 3, 386–396.

G – KWADRUPLEKSY JAKO CELE W TERAPII PRZECIWNOWOTWOROWEJ

Jan Kwiatkowski

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii
jankwi1@st.amu.edu.pl

DNA, nazywane kwasem deoksyrybonukleinowym jest to niezwykle długa cząsteczka, która przenosi informację genetyczną z pokolenia na pokolenie. W 1953 roku James Watson i Francis Crick zaproponowali model podwójnej helisy DNA, heliakalnej struktury składającej się z dwóch komplementarnych nici kwasu nukleinowego. W modelu stworzonym przez Watsona i Cricka zasady azotowe tworzą specyficzne wiązania wodorowe w myśl zasady komplementarności^[1].

Badania pokazały, że w komórkach żywych DNA może przybierać zupełnie odmienne struktury. Przykładem takich struktur są G – kwadrupleksy, czyli niekanoniczne struktury DNA stabilizowane przez wiązania wodorowe Hoogsteena. Odgrywają one istotną rolę w procesach biologicznych zachodzących w komórce. Odkryto, że pochodna diimidu naftalenu wykazuje aktywność antyproliferacyjną, hamującą rozwój guza trzustki poprzez wiązanie się z kwadrupleksami zakodowanymi w sekwencjach promotorowych genów BCL-2 oraz k-RAS. Po 40 dniach od zakończenia dawkowania terapeutycznego zaobserwowano spadek rozwoju guza o ponad 80%^[2].

¹ P. Graham, *Chemia medyczna*, Wydawnictwo naukowe PWN, Warszawa, 2019.

² S. A Ohnmacht, C. Marchetti, M. Gunarantam, R. Besser, S. Haider, G. Di Vita, H. Lowe, M. Mellinas-Gomez, S. Diocou, M. Robson, J. Sponer, B. Islam, R. Pedley, J. Hartley, S. Neidle, *Sci. Rep.*, 2015, 5.

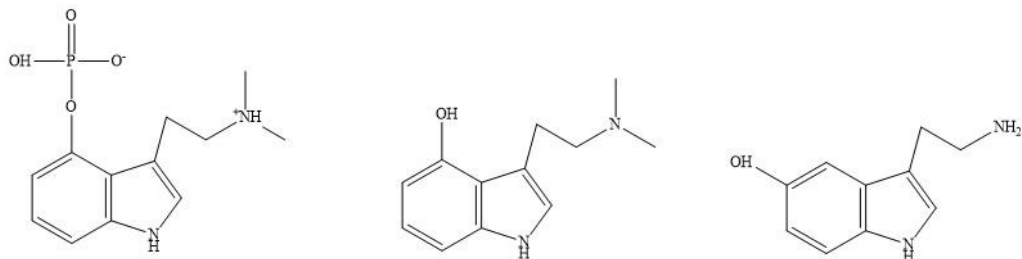
CHEMIA W WIERZENIACH – CZYLI O ŚRODKACH PSYCHOTROPOWYCH WYKORZYSTYWANYCH W KULTACH RELIGIJNYCH SŁÓW KILKA

Krzysztof Łucki

Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Wydział Chemii
krzysztof.lucki@student.uj.edu.pl

Wykopaliska archeologiczne w wielu częściach świata pozwalają poznać kulturę ludzi żyjących przed tysiącami lat. Wśród tych odkryć można znaleźć dowody na to, że ludność od pokoleń odurzała się substancjami psychotropowymi, m.in. enteogenami, które oddziałują mistycznie^[1].

Do silnych i niebezpiecznych psychodelików można zaliczyć m.in. Salwinorynę A znajdującą się w szalwii wieszczej lub mieszaninę dimetylotryptaminy i harmaliny będącą podstawą koktajlu o nazwie ayahuasca – napoju przyrządzanego przez południowoamerykańskich szamanów w celach religijnych lub medycznych, choć nie są to typowe sposoby leczenia. Nieodłącznym atrybutem rytuałów były również grzyby psychodeliczne, a dokładniej obecna w nich psylocybina oraz psylocyna. Aby psylocybina była w organizmie farmakologicznie czynna musi przejść defosforylację do psylocyny. To właśnie psylocyna odpowiada za aktywację reakcji psychodelicznych. Zarówno psylocybina, jak i psylocyna przypominają ważny neuroprzekaźnik – serotoninę^[2].



Rysunek. Wzory psylocybiny, psylocyny i serotoniny.

Katalog substancji, które mogą wywoływać mistyczne doświadczenia jest dość szeroki. Oprócz wspomnianych wcześniej środków psychoaktywnych możemy zaliczyć do nich także meskalinę i ibogainę^[1].

¹ B. Olszewski, *Jedzą, piją, łulki palą. Kulturowe aspekty korzystania z używek na przestrzeni dziejów*, Wydawnictwo Uniwersytetu Kazimierza Wielkiego w Bydgoszczy, Bydgoszcz, 2016, 19-33.

² A. Kołodziejczyk, *Naturalne związki organiczne*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2013, 460-463.

PIRAZOL JAKO KLUCZOWY ELEMENT STRUKTURALNY ZWIĄZKÓW BIOAKTYWNYCH

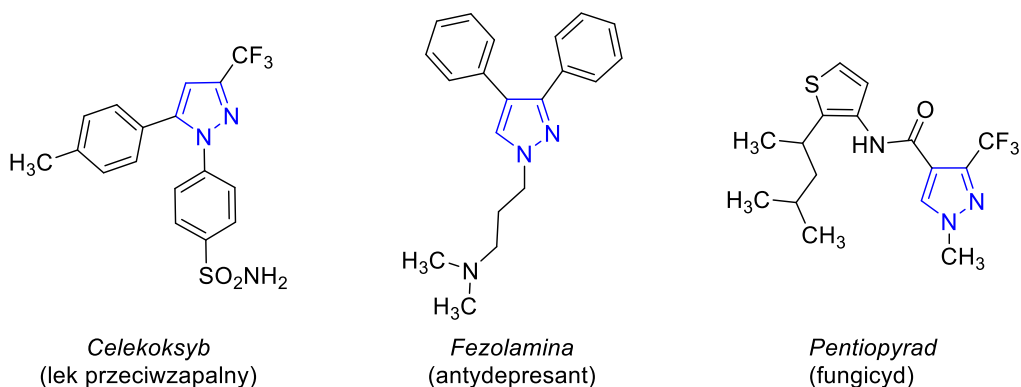
Barbara Olszewska^{1,2}, Kamil Świątek¹, Greta Utecht-Jarzyńska¹, Marcin Jasiński¹

¹ Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii

² Studenckie Koło Naukowe Chemików „Orbital” Uniwersytetu Łódzkiego

barbara.olszewska@edu.uni.lodz.pl

Pochodne pirazolu zajmują szczególne miejsce w nowoczesnej syntezie organicznej zorientowanej na poszukiwania związków bioaktywnych o znaczeniu praktycznym^[1]. Typowe zastosowania tej klasy połączeń obejmują obszary szeroko rozumianej agrochemii oraz farmakologii, jak również przemysłu kosmetycznego, spożywczego i materiałowego (np. chemii metaloorganicznej). Istotne miejsce w tym gronie zajmują pochodne zawierające w swojej strukturze atom(y) fluoru i/lub grupy fluoroalkilowe, których wprowadzenie moduluje szereg parametrów fizykochemicznych produktu, w tym stabilność termiczną, chemiczną i metaboliczną^[2]. W komunikacie omówione zostaną wybrane komercyjnie ważne pirazole, ze szczególnym uwzględnieniem pochodnych trifluorometylowanych^[3].



Rysunek Wybrane przykłady biologicznie aktywnych pochodnych pirazolu.

¹ J. Kujawski, *Synteza i właściwości biologiczne niektórych skondensowanych pochodnych pirazoli*, 2013, Poznań.

² P.K. Mykhailiuk, *Chem. Rev.*, 2021, 121, 1670-1715.

³ G. Utecht, A. Fruziński, M. Jasiński, *Org. Biomol. Chem.* 2018, 16, 1252-1257.

BUDOWA PRZESTRZENNA ENZYMU HYDROKSYLAZY FENYLOALANINY JAKO ŹRÓDŁO INFORMACJI O MUTACJACH POWODUJĄCYCH FENYLOKETONURIĘ

Miłosz Papierski

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii
milpap@st.amu.edu.pl

Fenyloketonuria jest wrodzoną chorobą genetyczną, którą dziedziczy się w sposób autosomalny recesywny. Do jej objawów należy m.in. znacznie zawyżony poziom egzogenego aminokwasu, fenyloalaniny, we krwi i płynach ustrojowych. Przyczyną takiego stanu rzeczy jest mutacja genu, znajdującego się na długim ramieniu chromosomu 12 (12q22-24.1), odpowiedzialnego za prawidłową ekspresję enzymu hydroksylazy fenyloalaniny (PAH), która przekształca fenyloalaninę w tyrozynę^[1].

Na bazie badań krystalograficznych, dowiedziono, że PAH posiada tetrameryczną budowę przestrzenną, w której każdy z czterech monomerów posiada własną domenę katalityczną, regulatorową oraz odpowiedzialną za tetrameryzację enzymu. Dodatkowo stwierdzono, że PAH wykazuje podobieństwo strukturalne do hydroksylazy tyrozyny^[2].

Konkretne zmiany strukturalne przypisano mutacjom w sekwencji nukleotydów, w obrębie locus genu PAH. Pozwoliło to na interpretacje, gdzie występują najczęstsze zmiany powodujące dysfunkcję enzymu i w konsekwencji rozwój choroby^[3].

W niniejszej pracy zademonstruje konsekwencje wyżej wspomnianej zależności strukturalnej od aktywności enzymu, oraz dodatkowo praca ta ma za zadanie zwrócić uwagę na potrzebę wykonywania genetycznych badań przesiewowych w populacji, celem profilaktyki chorób genetycznych i wdrażania odpowiednich terapii.

¹ G. Drewa, T. Ferenc, *Genetyka medyczna*, Elsevier Urban & Partner sp. z o. o., Wrocław, 2011, 218-220.

² F. Fusetti, H. Erlandsen, T. Flatmark, R. C. Stevens, *J. Biol. Chem.*, 1998, 273(27), 16962-16967.

³ H. Erlandsen, R. C. Stevens, *Mol. Genet. Metab.*, 1999, 68, 103-125.

SPOSÓB NA GLOBALNE OCIEPLENIE? METODY ABSORPCJI CO₂ PRZEZ RÓŻNE ORGANIZMY

Paulina Piwowarczyk, Jarosław Popłoński

Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności
paulinapiwowarczyk13@gmail.com

Dwutlenek węgla (CO₂) jest wydzielany podczas erupcji wulkanów, pożarów, czy podczas reakcji spalania paliw kopalnych, którą wykorzystujemy w celu pozyskania energii. Na przestrzeni ostatnich dekad człowiek używa coraz więcej urządzeń, które tej energii potrzebują. Dlatego wraz z rozwojem społeczeństw wzrasta zapotrzebowanie na energię elektryczną. Energia jest produkowana, ale wydzielany jest również dwutlenek węgla (11 mld ton CO₂ w 1960 do 35 mld ton w 2010^[1]), który jako jeden z kluczowych gazów cieplarnianych, jest zdolny do pochłaniania i wypromieniowania energii w różnych kierunkach. Dzięki temu część promieniowania jest zwracana z powrotem na ziemię, dlatego może zostać utrzymana optymalna do życia temperatura na ziemi^[2].

W środowisku CO₂ jest wychwytywany przez rośliny i bakterie, dla których jest niezbędnym składnikiem do przeprowadzenia fotosyntezy. Natomiast gdy nagromadzi się go więcej niż jest w stanie wrócić do obiegu poprzez wody czy organizmy żywe powstaje problem w postaci nagromadzenia CO₂ w atmosferze, a w następstwie do podwyższenia średniej temperatury na ziemi^[2].

Jednym z rozwiązań wspomagających zmniejszenie efektu cieplarnianego może być stosowanie organizmów, które naturalnie potrzebują znaczne ilości CO₂. Przykładami, które zostaną omówione w niniejszej pracy będą mikroorganizmy, takie jak cyjanobakterie, metylobakterie czy spirulina oraz drzewa modyfikowane genetycznie, które stanowią podstawę w tworzeniu biorafinerii 3 generacji. Wszystkie z wyżej wymienionych organizmów mają potencjał do wiązania CO₂ z atmosfery, a niektóre, hodowane na substratach odpadowych, wytwarzają dodatkowo związki chemiczne, np. kwas dekozaheksaenowy (DHA) czy kwas eikozapentaenowy (EPA)^[3].

¹ P. Friedlingstein i wsp., *ESSD*, 2022, 14(11), 4811-4900.

² IPCC, 2022: *Climate Change 2022: Impacts, Adaptation and Vulnerability*.

³ L. Hu i wsp., *Trends Biotechnol.*, 2019, 37(5), 532-547.

OD JADU WĘŻA DO EFEKTYWNEJ TERAPII – JAK POSZUKIWANO NOWYCH TERAPEUTYKÓW

Katarzyna Zimowska

Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii
katarzyna.zimowska@student.uj.edu.pl

Wśród składników jadu węży wyróżnia się peptydy i białka, które zalicza się jako neurotoksyny, kardiotoxyny, cytotoxyny, dezintegryny^[1], oraz wiele innych. Taka bogata mieszanina biologicznie aktywnych molekuł od dawna wydaje się być dobrym źródłem do poszukiwań nowych kandydatów na cząsteczki wiodące w procesach odkrywania i rozwijania leków. Milowym krokiem w procesie poszukiwania nowych terapeutyków inspirowanych strukturą białek wyizolowanych z jadu węży stało się zaakceptowanie kaptoprylu (Captopril) – pierwszego leku opracowanego na podstawie struktury białka (BPPs) wyizolowanego z jadu *Bothrops jararaca*^[2]. Od tego czasu na podstawie sklasyfikowanych molekuł opracowano wiele terapeutyków wykorzystywanych w leczeniu chorób sercowo-naczyniowych (Captopril, Triofiban, Eptifibatide), zakrzepicy, zapaleniu stawów^[3] oraz wielu innych.

Analiza składu jadu węży wykazała bardzo duży stopień zróżnicowania składników jadu pomiędzy poszczególnymi gatunkami węży. Pozwoliło to wzbogacić bazy związków biologicznie aktywnych, o grupę charakteryzującą się różnorodnymi mechanizmami molekularnymi działania^[2].

Znaczący wpływ na przyspieszenie procesu odkrywania i rozwijania terapeutyków (drug delivery i drug development) miało zastosowanie wysokoprzepustowego screeningu z wykorzystaniem biomolekuł^[1] zidentyfikowanych w jadzie poszczególnych gatunków węży.

Zauważenie tak ogromnej różnorodności molekuł izolowanych w jadzie, zwróciło szczególną uwagę na globalny kryzys różnorodności biologicznej, który zagraża populacjom węży^[2]. Ten środowiskowy problem może wprost zagrażać nadziejom na nowe leki, które potencjalnie można opracować na bazie składników jadu. Prezentowana praca przedstawia przegląd wybranych białek pochodzących z jadu węży oraz terapeutyków, które na ich podstawie opracowano.

¹ S. K. Pal, A. Gomes, S. Dasgupta, A. Gomes, *IJEB*, 2002, 40(2), 1353-1358.

² F. J. Vonk, K. Jackson, R. Doley, F. Madaras, P. J. Mirtschin, N. Vidal, *BioEssays*, 2011, 33(4), 269-279.

³ C. Y. Koh, R. M. Kini, *Toxicol*, 2012, 59(4), 497-506.



INDEKS UCZESTNIKÓW

Adamczyk	Magda	89	Groszek	Marcin	108
Barczyk	Joanna	104	Gryber	Tomasz	57
Barnowski	Konrad	113	Grzonka	Julia	100
Bernat	Sara	81	Hilarowicz	Julia	132
Bernatowicz	Dawid	60	Jagielska	Patrycja	68
Bogdanowicz	Natalia	114	Jaworska-Krych	Daria	73
Brezina	Jana	43	Kajzik	Adrianna	82
Czapura	Łukasz	98	Kaniecka	Maria	106
Ćwiertnia	Jakub	99	Karcz	Jakub	116
Dec	Daniel	44	Karpińska	Anna	76
Didovets	Yuliia	56	Kicińska	Agnieszka	77
Fajkis-Zajączkowska	Nikola	105	Kita	Beata	83
Gaweł	Marta	45	Kmiecik	Klaudia	47
Gęca	Marlena	46	Korcz	Oktawia	133
Gołdon	Agnieszka	115	Kowalczyk	Anna	117
Góralczyk	Masza	66	Kozioł	Sylwia	90

Kóleczo	Dominika	48	Olszewski	Adrian	51
Kukuła	Beata	49	Paluch	Dorota	61
Kunert	Tymoteusz	134	Papierski	Miłosz	138
Kwiatkowski	Jan	135	Piątkowski	Jakub	110
Łazuchiewicz	Maja	91	Piwowarczyk	Paulina	139
Łucki	Krzysztof	136	Polańska	Marta	85
Macioszek	Sebastian	118	Popper	Wiktor	69
Majer	Magdalena	101	Rychłowicz	Natan	122
Maliszewski	Bartosz	119	Ryza	Izabela	111
Marciniak	Lena	120	Siodlak	Natalia	123
Moćko	Wiktoria	121	Siwiak	Agnieszka	62
Morawska	Klaudia	50	Skoczeń	Aleksandra	78
Moskwa	Paulina	84	Skubalski	Jakub	52
Mróz	Aleksandra	58	Smaga	Gabriela	93
Nastula	Klaudia	92	Socha	Karolina	94
Nowotarski	Michał	129	Stando	Grzegorz	102
Okła	Karol	109	Staszak	Anna	70
Olszewska	Barbara	137	Stępień	Aleksandra	95

Sudomir	Urszula	53
Swebocki	Tomasz	63
Szymański	Bartosz	86
Szymura	Daniel	64
Śnioch	Weronika	87
Tłałka	Angelika	71
Warcholiński	Adrian	124
Warlich	Agata	125
Werner	Hanna	96
Wojtukiewicz	Joanna	126
Wypych	Monika	79
Wyźga	Beata	54
Zarzecki	Damian	127
Zimowska	Katarzyna	140
Zygadło	Mateusz	130

**Znajdź
nas na**



zjazdy.smptchem.pl 🔍



#SMPTChem