

CENTRUM BADAŃ
MOLEKULARNYCH I MAKROMOLEKULARNYCH PAN
90-363 Łódź, ul. Sienkiewicza 112

SPRAWOZDANIE

Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWO-BADAWCZEJ

w roku **2015**

Materiały

na posiedzenie Rady Naukowej CBMiM PAN

w dniu 8 lutego 2016 r.

Styczeń 2016

SPIS TREŚCI

Struktura CBMiM PAN.....	3
Rada Naukowa CBMiM PAN (kadencja 2015-2018)	4
Członkostwo pracowników naukowych CBMiM PAN w radach redakcyjnych czasopism naukowych w 2015 r.....	5
Udział pracowników naukowych CBMiM PAN w komitetach naukowych i organizacyjnych konferencji naukowych w 2015 r.....	6
Udział, członkostwo w naukowych organizacjach krajowych i międzynarodowych z wyboru lub powołania (2015 r.)....	7
DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA	
Wstęp.....	10
Finansowe podstawy działania CBMiM PAN.....	10
Uczestnictwo w programach operacyjnych.....	10
Teaming for Excellence.....	10
Działalność naukowa.....	11
Patenty.....	14
Rozwój kadry naukowej.....	15
Działalność dydaktyczna.....	16
Środowiskowe Laboratorium Fizykochemicznych Badań Związków Organicznych i Polimerów.....	16
Biblioteka.....	16
Nagrody i wyróżnienia.....	17
SPRAWOZDANIA Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWEJ	
Ważniejsze osiągnięcia działalności statutowej.....	20
Zakład Chemii Heteroorganicznej.....	23
Zakład Chemii Bioorganicznej.....	28
Samodzielna Pracownia Modelowania Komputerowego.....	38
Zakład Chemii Polimerów.....	39
Zakład Inżynierii Materiałów Polimerowych.....	41
Zakład Fizyki Polimerów.....	43
Samodzielna Pracownia Struktury Polimerów.....	45
Samodzielna Pracownia Badań Strukturalnych.....	46
REALIZACJA GRANTÓW	
Najważniejsze osiągnięcia ubiegłego roku w realizacji projektów badawczych.....	50
Granty NCN.....	55
Granty NCBiR oraz OPI.....	72
SPRAWOZDANIE ZE WSPÓŁPRACY Z ZAGRANICĄ	
Wymiana osobowa.....	75
SPIS PUBLIKACJI, REFERATÓW I KOMUNIKATÓW	
Spis publikacji wydrukowanych w 2015 r.	77
a. Monografie, syntezy, podręczniki.....	77
b. Artykuły przeglądowe.....	77
c. Artykuły naukowe.....	78
c. 1. Artykuły naukowe w czasopismach, które ukazały się dotychczas tylko w wersji elektronicznej.....	91
c. 2. Lista struktur zdeponowanych w PDB (Protein Data Bank).....	93
d. Referaty.....	93
d.1. Referaty –konferencje międzynarodowe.....	93
d.2. Referaty-konferencje krajowe.....	95
d.3. Wykłady i referaty wygłoszone za granicą – na zaproszenie instytucji naukowych – niebędące referatami czy wykładami w trakcie konferencji ani działalnością dydaktyczną.....	96
d.4. Wykłady na zaproszenie instytucji krajowych– na zaproszenie instytucji naukowych – niebędące referatami czy wykładami w trakcie konferencji ani działalnością dydaktyczną.....	97
e. Komunikaty.....	97
e.1. konferencje międzynarodowe.....	97
e.2. konferencje krajowe.....	99
f. Postery.....	101
f.1. konferencje międzynarodowe.....	101
f.2. konferencje krajowe.....	106
Spis publikacji przyjętych do druku w 2015 r.....	109
Wykaz planowanych na 2016 r. zadań w ramach działalności statutowej.....	111
Program Sesji Sprawozdawczej.....	112

Struktura CBMiM PAN

Dyrektor

Zastępca Dyrektora d/s Naukowych
Zastępca Dyrektora d/s Technicznych i Ogólnych
Główna Księgowa

prof. dr hab. Stanisław Słomkowski

prof. dr hab. Marek Potrzebowski
mgr Krzysztof Ławiński
mgr Grażyna Jasińska

W skład CBMiM PAN wchodzi następujące zakłady, pracownie i zespoły badawcze:

Zakład Chemii Heteroorganicznej (prof. dr hab. Piotr Kielbasiński):

- Zespół I - Pracownia Stereochemii;
- Zespół II - Pracownia Syntezy Materiałów Funkcjonalnych;
- Zespół III - Pracownia Katalizy i Biotransformacji;
- Zespół IV - Pracownia Syntezy Związków Biologicznie Czynnych;

Zakład Chemii Bioorganicznej (prof. dr hab. Barbara Nawrot):

- Zespół V - Pracownia Proleków;
- Zespół VI - Pracownia Syntezy Oligonukleotydów i ich Analogów;
- Zespół VII - Pracownia Przesiewowa;
- Zespół VIII - Pracownia Terapeutycznych Oligonukleotydów;
- Zespół IX - Pracownia Struktury i Fizykochemii Oligonukleotydów;
- Zespół X - Pracownia Medycyny Molekularnej;

Samodzielna Pracownia Modelowania Komputerowego (prof. dr hab. Marek Cypryk):

Zespół XI

Zakład Chemii Polimerów (prof. dr hab. Andrzej Duda):

- Zespół XII - Pracownia Kontrolowanej Polimeryzacji Cyklicznych Estrów;
- Zespół XIII - Pracownia Syntezy Hybryd Organiczno – Nieorganicznych;
- Zespół XIV - Pracownia Polimerów Reaktywnych;
- Zespół XV - Laboratorium Analizy Związków Wielkocząsteczkowych;

Zakład Inżynierii Materiałów Polimerowych (prof. dr hab. Stanisław Słomkowski):

- Zespół XVI - Pracownia Cienkich Warstw i Nanostruktur;
- Zespół XVII - Pracownia Koloidów;
- Zespół XVIII - Pracownia Kompozytów Nieorganiczno - Organicznych;
- Zespół XIX - Pracownia Fizykochemii Materiałów Hybrydowych;
- Zespół XX - Pracownia Polimerów Reaktywnych i Modyfikacji Chemicznej Polimerów;

Zakład Fizyki Polimerów (prof. dr hab. Andrzej Gałęski):

- Zespół XXI - Pracownia Struktury Powierzchni Materii Miękkiej;
- Zespół XXII - Pracownia Właściwości Mechanicznych Materiałów Polimerowych;
- Zespół XXIII - Pracownia Materiałów Lekkich i Wytrzymałych;

Samodzielna Pracownia Struktury Polimerów (prof. Ewa Piórkowska – Gałęska):

Zespół XXIV

Samodzielna Pracownia Badań Strukturalnych (prof. dr hab. Marek Potrzebowski):

Zespół XXV

Środowiskowe Laboratorium Fizykochemicznych Badań Związków Organicznych i Polimerów

Zespół XXVI (prof. dr hab. Marek Potrzebowski):

Pracownia Mikroanalizy (prof. dr hab. Tadeusz Biela):

Zespół XXVII

Zakład Chemii Polimerów (prof. dr hab. Andrzej Duda):

Zespół XXVIII - Zespół Funkcjonalnych Polimerów Biozgodnych.

Występujące w tekście sprawozdania skróty ZChH, ZChB, SPMK, ZChP, ZIMP, ZFP, SPSP, SPBS, LŚ, PM odpowiadają kolejnym Zakładom i Pracowniom.

Materiały dotyczące działalności CBMiM PAN powstały na podstawie informacji uzyskanych od Kierowników Zakładów i Pracowni.

Rada Naukowa CBMiM PAN

Skład Rady Naukowej (kadencja 2015-2018)

Przewodniczący:	Prof. dr hab. Henryk Kozłowski (Uniwersytet Wrocławski)
Wiceprzewodniczący:	Prof. dr hab. Piotr Paneth
Sekretarz:	dr Rafał Dolot
Prof. dr hab. Piotr Bałczewski	CBMiM/Akademia im.J.Długosza w Częstochowie
Prof. dr hab. Zbigniew Bartczak	CBMiM PAN w Łodzi
Dr hab. Tadeusz Biela, prof. CBMiM	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Andrzej Błędzki	Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny w Szczecinie
Dr Agnieszka Bodzioch	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Marek Chmielewski	Instytut Chemii Organicznej PAN w Warszawie, członek korespondent PAN
Prof. dr hab. Julian Chojnowski	CBMiM PAN w Łodzi
Mgr Jacek Chrzanowski	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Marek Cypryk	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Józef Drabowicz	CBMiM/Akademia im.J.Długosza w Częstochowie
Prof. dr hab. Andrzej Duda	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Andrzej Dworak	Centrum Materiałów Polimerowych i Węglowych PAN
Prof. dr hab. Zbigniew Florjańczyk	Politechnika Warszawska
Prof. dr hab. Henryk Galina	Politechnika Rzeszowska
Prof. dr hab. Andrzej Gałęski	CBMiM PAN w Łodzi
Dr hab. Piotr Guga, prof. CBMiM	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Sławomir Jarosz	Instytut Chemii Organicznej PAN w Warszawie
Prof. dr hab. Paweł Kafarski	Politechnika Wrocławska
Prof. dr hab. Piotr Kiełbasiński	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Barbara Klajnert-Maculewicz	Uniwersytet Łódzki
Dr hab. Anna Kowalewska	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Maria Koziółkiewicz	Politechnika Łódzka
Prof. dr hab. Bogdan Marciniak	Uniwersytet im. A. Mickiewicza w Poznaniu, członek rzeczywisty PAN
Prof. dr hab. Wojciech Markiewicz	Instytut Chemii Bioorganicznej PAN, Poznań
Prof. dr hab. Mieczysław Mąkosza	Instytut Chemii Organicznej PAN w Warszawie, członek rzeczywisty PAN
Prof. dr Jan Michalski	CBMiM PAN w Łodzi, członek rzeczywisty PAN
Prof. dr hab. Marian Mikołajczyk	CBMiM PAN w Łodzi, członek rzeczywisty PAN
Prof. dr hab. Grzegorz Mlostoń	Uniwersytet Łódzki
Prof. dr hab. Barbara Nawrot	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Maria Nowakowska	Uniwersytet Jagielloński
Prof. dr hab. Stanisław Penczek	CBMiM PAN w Łodzi, członek korespondent PAN
Prof. dr hab. Marek Potrzebowski	CBMiM PAN w Łodzi
Mgr Joanna Skalik	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Stanisław Słomkowski	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Włodzimierz Stańczyk	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Wojciech J. Stec	CBMiM PAN w Łodzi, członek rzeczywisty PAN
Dr Agnieszka Tomaszewska-Antczak	CBMiM PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Jacek Ulański	CBMiM PAN w Łodzi

Członkostwo pracowników naukowych CBMiM PAN w radach redakcyjnych czasopism naukowych w 2015 r.

Biomacromolecules, S. Słomkowski (2008)
Central European Journal of Chemistry, M. Mikołajczyk, S. Penczek (2003)
Chemistry Environment Biotechnology, P. Bałczewski, redaktor naczelny czasopisma i redaktor działu
Chemistry, z wyboru (2010)
Chemistry Environment Biotechnology, prof. J. Drabowicz, redaktor działu Chemisty w wyboru (2010)
Chemistry Letters, M. Mikołajczyk
Current Organic Chemistry, S. Penczek - Guest Editor for Polymer Chemistry (2000)
Egyptian Journal of Chemistry, M. Mikołajczyk
e-Polymers, S. Słomkowski (2006)
Frontiers in Chemistry, associate editor, A. Gałęski (2012)
Heteroatom Chemistry, M. Mikołajczyk
International Journal of Polymer Science, M. Cypryk (2009)
ISRN Organic Chemistry, P. Bałczewski, członek Rady Redakcyjnej, na zaproszenie, (2010), J. Drabowicz
Journal of Applied Polymer Sciences Wiley, A. Gałęski (1996)
Journal of Biomedical Nanotechnology, S. Słomkowski (2005)
Journal of Colloid Science and Nanotechnology, T. Basińska (2012), S. Słomkowski (2012)
Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials, J. Chojnowski (1990)
Journal of Materials, A. Gałęski (2010)
Journal of Nanostructured Polymers and Nanocomposites, A. Gałęski (2007)
Macedonian Journal of Chemistry and Chemical Engineering, S. Słomkowski (2008)
Materials Science, A. Gałęski (2009)
Nucleic Acid Therapeutics, B. Nawrot, W. J. Stec (2009)
The Open Macromolecular Journal, S. Penczek (2013)
Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements, prof. dr hab. J. Drabowicz (2015)
Polimery, M. Cypryk (2011), A. Duda (1995), P. Kubisa (2006), S. Słomkowski (2013), S. Penczek (2003 –
Przewodniczący Rady Redakcyjnej)
Polymer International, S. Penczek (1991)
Polymers for Advanced Technologies, S. Słomkowski (2011)
Progress in Polymer Sciences, S. Penczek (1988)
Recent Patents on Materials Science, S. Słomkowski (2007)
RNA Nanotechnology, A. Chworoś (2012)
Science of Synthesis-Update Volume Editor dla Vol. 33 i Vol. 39, J. Drabowicz
Silicon, J. Chojnowski (2007)
Solid State Nuclear Magnetic Resonance, wyd. Elsevier, M. Potrzebowski (2015)
Wiadomości Chemiczne, M. Potrzebowski (2010)

Udział pracowników naukowych CBMiM PAN w komitetach naukowych i organizacyjnych konferencji naukowych w 2015 roku

Udział w komitetach organizacyjnych, naukowych, programowych konferencji międzynarodowych:

B. Bujnicki, T. Cierpień, J. Drabowicz, (przewodniczący Komitetu Organizacyjnego), P. Kielbasiński, J. Krysiak, P. Łyżwa, W. H. Midura, A. Zając
XVIII International Symposium „Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” Łódź, 20 listopada 2015

J. Drabowicz, XIII International Symposium on Selected Problems of Chemistry of Acyclic and Cyclic Heteroorganic Compounds, Częstochowa, 19 listopada 2015

J. Drabowicz (przewodniczący Komitetu Organizacyjnego), P. Kielbasiński (wiceprzewodniczący K.O.), The VII International Symposium on Halogen Chemistry (Halchem-VII), Częstochowa, 3-6 września 2015

J. Drabowicz, członek Międzynarodowego Komitetu Doradczego, członek Komitetu Organizacyjnego, XXVII International Symposium on the Chemistry of Organic Sulfur Compounds (ISOCS-27), Jena, 23-29 lipca 2015

M. Mikołajczyk, członek International Scientific Committee of International Conference on Heteroatom Chemistry

B. Nawrot, P. Guga, A. Chworoś, A. Krakowiak
International Symposium on Nucleic Acid Therapeutics, Łódź, 15-16 października 2015

S. Penczek – International Advisory Board, International Conference on Nanomaterials and Nanotechnology; Nano 15, 7-10 grudnia 2015, Tiruchengode, Indie,

W. Stańczyk, 10th International Workshop on Silicon-Based Polymers

S. Słomkowski, 13th International Conference of Polymers for Advanced Technology (PAT 2015)

S. Słomkowski, EMRS Spring Meeting, Symposium X

A. Gałęski, panelist, 6th INNOVATIONS FORUM: Plastics in Harmony with Nature, Rzeszów, 17-19 czerwca 2015

Udział w komitetach organizacyjnych, naukowych, programowych konferencji krajowych:

P. Bałczewski - 58 Zjazd PTChem, Gdańsk, 21-26 września 2015 (członek Komitetu Naukowego)

P. Kielbasiński – (przewodniczący Komitetu Organizacyjnego), P. Guga - wiceprzewodniczący (K.O), R. Żurawiński – (sekretarz K.O), J. Drabowicz, W. H. Midura, A. Stefańska, (członkowie K.O.)
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, Łódź 16-18 kwietnia 2015

A. Kowalewska, M. Nowacka, K. Piórecka, S. Słomkowski - XXIII Ogólnopolskie Seminarium „Postęp w Chemii, Fizyce i Technologii Polimerów”

A. Gałęski, XXII Konferencja Naukowa Modyfikacja Polimerów, Kudowa-Zdrój, 21-23 września 2015

P. Sowiński, II Warsztaty Przedsiębiorczości Akademickiej, Uniejów, 6–9 lipca 2015

P. Sowiński, B. Gostyński, Konferencja Mała Wielka Nauka, Łódź, 10-11 grudnia 2015

Udział, członkostwo w naukowych organizacjach krajowych i międzynarodowych z wyboru lub powołania (w 2015 roku)

Prof. dr hab. Piotr Bałczewski	<ul style="list-style-type: none"> • I wiceprezes, członek Prezydium i Zarządu Głównego PTChem kadencji 2013-2015, • członek międzynarodowego zespołu ekspertów ds. oceny i promocji kadry International Center for Chemical Sciences, HEJ Research Institute of Chemistry, University of Karachi, Pakistan • członek międzynarodowego zespół ekspertów ds. oceny kadry w University of Thessaloniki, Grecja • przedstawiciel PTChem w Radzie Właścicieli Analytical and Bioanalytical Chemistry (ABC) – Springer • przedstawiciel PTChem w Radzie Właścicieli Chemistry A. European Journal-Wiley • przedstawiciel PTChem w Radzie Właścicieli Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP) – Royal Society of Chemistry • przedstawiciel PTChem w EuCheMS (European Association for Chemical and Molecular Sciences)
Dr hab. Teresa Basińska	<ul style="list-style-type: none"> • członek Zarządu Oddziału Łódzkiego PTChem
Dr hab. Arkadiusz Chworóś	<ul style="list-style-type: none"> • członek Komisji Współdziałania Nauk Biologiczno-Chemiczno-Medycznych przy Oddziale PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Józef Drabowicz	<ul style="list-style-type: none"> • przewodniczący Częstochowskiego Oddziału PTChem
Prof. dr hab. Markus Duechler	<ul style="list-style-type: none"> • członek Komisji Współdziałania Nauk Biologiczno-Chemiczno-Medycznych przy Oddziale PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Andrzej Duda	<ul style="list-style-type: none"> • członek Komitetu Chemii PAN
Prof. dr hab. Andrzej Gałęski	<ul style="list-style-type: none"> • przewodniczący Zespołu Materiałów Polimerowych Komitetu Nauki o Materiałach PAN • członek Komitetu Nauki o Materiałach PAN • członek IUPAC Subcommittee on Structure and Properties of Commercial Polymers • członek Komitetu Naukowego World Forum for Advanced Materials • członek European Scientific Association for Material Forming, ESAFORM • członek stowarzyszony IUPAC • członek Polskiego Towarzystwa Mikroskopii • członek International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) • członek Polymer Processing Society
Prof. dr hab. Piotr Guga	<ul style="list-style-type: none"> • członek Komisji Współdziałania Nauk Biologiczno-Chemiczno-Medycznych przy Oddziale PAN w Łodzi
Prof. dr hab. Piotr Kiełbasiński	<ul style="list-style-type: none"> • członek Management Committee <i>COST Action CM1303</i> "Systems Biocatalysis" • przewodniczący Sekcji Chemii Heteroorganicznej PTChem • członek Komisji Biotechnologii przy Oddziale PAN w Łodzi • członek Komisji Etyki przy Oddziale PAN w Łodzi
Dr hab. Ewa Krawczyk-Sójka	<ul style="list-style-type: none"> • przewodnicząca Komisji Rewizyjnej Oddziału Łódzkiego PTChem
Prof. dr hab. Wanda H. Midura	<ul style="list-style-type: none"> • członek Zarządu Oddziału Łódzkiego PTChem
Prof. dr hab. Marian Mikołajczyk	<ul style="list-style-type: none"> • członek rzeczywisty PAN • członek Komitetu Chemii PAN • członek Niemieckiej Narodowej Akademii Nauk Leopoldina • członek Oddziału PAN w Łodzi

Prof. dr hab. Barbara Nawrot	<ul style="list-style-type: none"> • członek Podkomisji Biotechnologii IUPAC • członek Komitetu Biotechnologii PAN • członek Komitetu Biochemii i Biofizyki PAN • przewodnicząca Komisji ds. Współdziałania Nauk Chemiczno-Biologiczno-Medycznych przy Oddziale PAN w Łodzi • członek Komisji Biotechnologii przy Oddziale PAN w Łodzi • członek Komitetu ewaluacyjnego projektów Human Frontier Science Program, Strasbourg, Francja
Prof. dr hab. Stanisław Penczek	<ul style="list-style-type: none"> • członek rzeczywisty PAN • członek korespondent PAU • członek Prezydium Komitetu Chemii PAN • członek korespondent Nordrheinische Akademie der Wissenschaften (Wydział Nauk Ścisłych i Medycznych) • członek honorowy Izraelskiego Towarzystwa Chemicznego
Prof. dr hab. Marek Potrzebowski	<ul style="list-style-type: none"> • członek komisji „Krystalografia NMR i metody pokrewne”, w ramach Międzynarodowej Unii Krystalografii (International Union of Crystallography)
Prof. dr hab. Ewa Piórkowska-Gałęska	<ul style="list-style-type: none"> • członek IUPAC Subcommittee Structure and Properties of Commercial Polymers
Prof. dr hab. Stanisław Słomkowski	<ul style="list-style-type: none"> • członek Komitetu Chemii PAN • przewodniczący Komisji Materiałów Biomedycznych Łódzkiego Oddziału PAN • członek International Polymer Colloids Group • członek IUPAC Subcommittee on Polymer Terminology, Task Group Leader
Prof. dr hab. Wojciech J. Stec	<ul style="list-style-type: none"> • członek rzeczywisty PAN • członek Komitetu Chemii PAN • Wiceprzewodniczący Rady Gubernatorów ICGEB, gubernator na obszar Polski

DZIAŁALNOŚĆ STATUTOWA

WSTĘP

Finansowe podstawy działania CBMiM PAN

W 2013 r., po przeprowadzeniu kompleksowej oceny jednostek naukowych, Komitet Ewaluacji Jednostek Naukowych przyznał Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN kategorię B (decyzja MNiSW nr 165/KAT/2013 z dn. 23 października 2013 r.).

Na dofinansowanie działalności statutowej Centrum w roku 2015 została przyznana kwota 8 629 210 zł.

Środki finansowe na badania pochodzą również z grantów MNiSW, NCN oraz NCBiR - w 2015 r. w Centrum realizowano łącznie 47 grantów badawczych, z których w ciągu ubiegłego roku zakończono 10 projektów i rozpoczęto 13 nowych.

Ogólna liczba zatrudnionych (stan na 31.12.2015) wynosiła 189 osób (dla 8 osób CBMiM PAN było drugim miejscem pracy), 31 grudnia 2015 roku Centrum zatrudniało 67 pracowników naukowych.

W tej liczbie było:

-profesorów zwyczajnych	- 8
-profesorów nadzwyczajnych	- 10
-adiunktów	- 18
-asystentów	- 31
-pozostałych (inż.-techn., administracja, obsługa)	- 114

Zatrudnienie średnioroczne w przeliczeniu na pełne etaty wyniosło ogółem 171,33.

Uczestnictwo w programach operacyjnych

CBMiM PAN uczestniczyło w realizacji dwóch projektów w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka:

- *Patent Plus: Ochrona patentowa nowych połączeń chemicznych o działaniu przeciwnowotworowym oraz metod ich syntezy; kierownicy: Piotr Bałczewski, Barbara Nawrot*
- *Enzyme-promoted synthesis of chiral analogues of 1,3,5-triaza-7-phospha-adamantane (PTA), potential water-soluble phosphine ligands and catalysts (POMOST), koordynator Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, kierownik dr Małgorzata Kwiatkowska.*

Teaming for Excellence

Udział CBMiM PAN w konsorcjum (Politechnika Łódzka, Uniwersytet Łódzki, Uniwersytet Medyczny w Łodzi) przygotowującym projekt International Centre for Research on Innovative Biobased Materials (ICRI-BioM); jeden z trzech polskich projektów zakwalifikowanych przez Komisję Europejską do drugiego etapu w ramach konkursu Teaming for Excellence.

W ramach *Teaming for excellence* najlepsze polskie instytucje naukowe mają szansę na partnerstwo strategiczne z wiodącymi ośrodkami naukowymi w Europie. Konkurs umożliwia zarówno tworzenie nowych centrów doskonałości, jak i wzmacnianie już istniejących jednostek w słabiej rozwiniętych regionach. To także niepowtarzalna szansa dla Polaków, którzy włączając się w duże międzynarodowe konsorcja badawcze, mogą przenosić innowacyjne rozwiązania oraz wyniki prac badawczo-rozwojowych na grunt naszej rodzimej gospodarki.

Łącznie na konkurs *Teaming for Excellence* spłynęło 169 wniosków, w tym 19 z Polski. Konkurs składa się z dwóch etapów. Pierwszy służy wyłonieniu najbardziej innowacyjnych propozycji, które dostają środki na rozwinięcie pomysłu. Zwycięzcy drugiego etapu dostają dofinansowanie na złożone w ramach konkursu projekty.

Działalność naukowa

Publikacje, udział w konferencjach

W 2015 roku ukazały się 132 publikacje (bez referatów i komunikatów konferencyjnych), w tym 6 to rozdziały w monografiach, a 8 to artykuły przeglądowe.

120 publikacji (w tym artykuły oryginalne i przeglądy) zamieszczono w czasopismach posiadających Impact Factor.

129 pracowników Centrum brało udział w konferencjach międzynarodowych i krajowych, gdzie ogółem zaprezentowano: 33 referaty i przedstawiono 50 komunikatów i 109 posterów.

Organizacja konferencji naukowych

CBMiM było organizatorem /współorganizatorem 7 spotkań naukowych (konferencje, sympozja, warsztaty) o charakterze międzynarodowym i krajowym.

X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), Łódź 16-18 kwietnia 2015 r.

Organizatorzy: Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, (ZChH, ZChB); Wydział Chemii UŁ; Oddział Łódzki Polskiego Towarzystwa Chemicznego. Konferencja krajowa. Wygłoszono 9 wykładów, 40 komunikatów ustnych, 130 posterów (195 zarejestrowanych uczestników).

Udział pracowników CBMiM PAN: 5 komunikatów, 16 plakatów.

7th International Meeting on Halogen Chemistry (HALCHEM VII), Częstochowa, 3-6 września 2015 r.

Organizatorzy: Instytut Chemii, Ochrony Środowiska i Biotechnologii AJD w Częstochowie, Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN (ZChH); Wydział Chemii UŁ. Konferencja międzynarodowa. Zaprezentowano 13 wykładów, 3 komunikaty ustne, 17 posterów (33 zarejestrowanych uczestników).

Udział pracowników CBMiM PAN: 2 wykłady, 4 plakaty.

XVIII International Symposium „Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds”, Łódź, 20 listopada 2015 r.

Organizatorzy: Sekcja Chemii Heteroorganicznej PTChem, Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN (ZChH). Konferencja międzynarodowa. Przedstawiono 5 wykładów i 105 posterów. (135 zarejestrowanych uczestników konferencji).

Udział pracowników CBMiM PAN: 7 plakatów.

XIII International Symposium on Selected Problems of Chemistry of Acyclic and Cyclic Heteroorganic Compounds, Akademia Jana Długosza w Częstochowie, 19 listopada 2015 r.

Organizatorzy: Instytut Chemii, Ochrony Środowiska i Biotechnologii AJD w Częstochowie, Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN (ZChH), Sekcja Chemii Heteroorganicznej PTChem. Konferencja międzynarodowa. Przedstawiono 5 wykładów (50 zarejestrowanych uczestników konferencji).

Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics dedykowana Prof. Wojciechowi Stecowi z okazji 75 Urodzin, Łódź, 15-16 października 2015 r.

Organizatorzy: Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN (ZChB), Łódzki Oddział PAN. Konferencja międzynarodowa. Zaprezentowano 11 referatów (150 zarejestrowanych uczestników konferencji).

Udział pracowników CBMiM PAN: 10 komunikatów, 12 plakatów.

XV Ogólnopolskie Warsztaty Naukowe: Postęp w Kontrolowanej Polimeryzacji Rodnikowej, Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN Łódź, 30 czerwca 2015 r.

Organizatorzy: Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN (ZChP). Konferencja krajowa. Wykładowca: Prof. dr hab. Krzysztof Matyjaszewski (J. C. Warner University Professor of Natural Sciences, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, USA / Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN w Łodzi. Przedstawiono 4 wykłady: „Metale na zerowym stopniu utlenienia

w ATRP”, „ATRP bez Cu, ale wspomagana światłem?”, „Polimerowe szczotki, sieci i żele”, „Ciecze jonowe i nanostrukturalne formy węgla via ATRP”. W warsztatach wzięło udział 65 osób.

XXIII Ogólnopolskie Seminarium „Postęp w Chemii, Fizyce i Technologii Polimerów”, 21 maja 2015 r. Organizatorzy: Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN (ZIMP). Konferencja krajowa. Wygłoszono 3 referaty (50 zarejestrowanych uczestników). Udział pracowników CBMiM PAN: 1 referat.

Wykłady ogólnoinstitutowe

W 2015 r. odbyło się trzynaście wykładów ogólnoinstitutowych. Wykłady wygłosili:

Dr Bożena Zgardzińska, prof. Dietmar W. Auhl, prof. Roman Dembiński, dr Viktor Iaroshenko, dr Goergiy Kachkovskiy, dr hab. Jarosław Kłos, dr hab. Melania Bednarek, prof. Janusz Grębowicz, prof. Michaela Zehetbauer, dr Harald Wilhelm, prof. Barbara Trzebicka, prof. Justin Dirrenberger, prof. Binne Zwanenburg.

Udział jednostki w przedsięwzięciach promujących i popularyzujących wyniki badań naukowych (np. festiwale i pikniki naukowe, wystawy i targi, w tym targi książki, artystyczne, inne):

W dniach 20-27 kwietnia 2015 roku w Łodzi odbyła się XV edycja Festiwalu Nauki, Techniki i Sztuki. Hasło tegorocznego Festiwalu brzmiało „Od Łodzi przemysłowej do akademickiej”. W ramach Festiwalu pracownicy Centrum wygłosili sześć wykładów o charakterze popularno-naukowym, brali udział w Dniach Otwartych w CBMiM PAN oraz Pikniku Naukowym.

Wykłady przedstawione w ramach Festiwalu Nauki, Techniki i Sztuki w dniach 23-24 kwietnia 2015 r.

- dr hab. Anna Kowalewska w wykładzie zatytułowanym „Nano jest piękne” przedstawiła historię sposobu wytwarzania witraży i zjawiska fizykochemiczne odpowiadające za ich kolor, który uzyskiwany jest przez dodanie związków metali w czasie topienia masy szklanej. Tworzące się w tym procesie nanocząstki, w zależności od swoich rozmiarów, wykazują silną absorpcję w zakresie widzialnym i ultrafiolecie dzięki możliwości wzbudzenia na nich zlokalizowanych plazmonów powierzchniowych.
- mgr Maria Nowacka w swoim wystąpieniu opowiadała o „Chemii uczuć”. Pokazała w jakim stopniu zachowanie i decyzje podejmowane przez ludzi są zależne od substancji chemicznych wytwarzanych przez organizm człowieka oraz od ludzkich instynktów. W ramach prezentacji przedstawiła również jaki wpływ na nas mają wybrane hormony i neurotransmitery, a także omówiła możliwe skutki zaburzeń poziomu tych substancji. Na przykładzie miłości zaprezentowała ogromny wpływ uczuć na cały nasz organizm.
- mgr Damian Mickiewicz, przedstawił prezentację zatytułowaną „Reguła przekory na co dzień”. Wykład wspomagany był doświadczeniami wykonywanymi przez samych uczniów. Mgr D. Mickiewicz zademonstrował eksperymenty pokazujące, że jakakolwiek zmiana powoduje, iż układy próbują wrócić do stanu wyjściowego. Wraz ze słuchaczami odpowiadał na pytania: - dlaczego sól z lodem obniża swoją temperaturę zawsze do -22°C , niezależnie od temperatury początkowej lodu, - dlaczego eter i aceton na skórze dają uczucie zimna, - dlaczego zalanie bezwodnego siarczanu magnezu wodą powoduje, że woda zaczyna wrzeć, a z kolei rozpuszczanie uwodnionego siarczanu magnezu powoduje obniżanie temperatury.
- dr Agnieszka Tomaszewska-Antczak wygłosiła cykl wykładów w Zespole Szkół im. Romualda Traugutta w Lipnie. Celem wykładów było zwiększenie zainteresowania uczniów chemią oraz ukazanie tej dziedziny nauki jako „lekkiej i przyjemnej”. W wykładzie pt. „Czekolada grzechu warta” autorka opowiadała: jak powstaje czekolada, co naprawdę kryje w sobie słodka tabliczka oraz pokazała pozytywny wpływ niektórych składników czekolady na organizm ludzki. W drugim wykładzie zatytułowanym „Po drugiej stronie lustra....czyli słów kilka o chiralności” prelegentka próbowała odpowiedzieć na pytania: Czy w otaczającym nas świecie związków chemicznych są takie, które pozostają w stosunku do siebie jak przedmiot i jego lustrzane odbicie? Czy związki chemiczne zbudowane z tych samych atomów połączonych w tej samej kolejności są zawsze identyczne?

Trzecia prezentacja pt. „Chemia w sądzie. Przesłuchanie niemych świadków” cieszyła się wśród młodzieży największym zainteresowaniem. Wykład miał na celu ukazanie zastosowania chemii i biologii molekularnej w naukach laboratoryjnych stosowanych w kryminalistyce i chemii sądowej umożliwiające odnalezienie i schwytanie winnego. W przedstawionych wykładach wzięli udział gimnazjaliści i uczniowie liceum, wśród których znajdowały się zarówno osoby zdające w tym roku maturę z chemii jak i planujące ją zdawać w latach następnych.

PIKNIK NAUKOWY 25.04-26.04.2015: MANUFAKTURA

Pokazy naukowe:

1. Nieznane oblicza dwutlenku węgla

Pokazy ilustrujące różnice w gęstościach różnych gazów. Wyjaśnienie na przykładzie "suchego lodu" zjawiska sublimacji. Wykorzystanie stałego dwutlenku węgla w reakcjach barwnych ze wskaźnikami kwasowo-zasadowymi.

Prowadzący: dr Grażyna Mielniczak, dr Krzysztof Owsianik, dr Marek Koprowski

2. Prezentacja multimedialna najnowszych osiągnięć biologii molekularnej

Zaprezentowano wizualizację kompleksów biocząsteczek RNA i białek jak również całych komórek ludzkich wybarwionych związkami fluorescencyjnymi.

Prowadzący: dr hab. Arkadiusz Chworoś, mgr Dominika Jędrzejczyk, mgr Justyna Milczarek

3. Chemiczne dziwności

Pokaz naukowy przedstawiający chemiczny ogród zoologiczny, kiełkowanie chemicznych nasion, wzrost rafy koralowej a nawet zabawy z ryczącym kamieniem i inne atrakcje dla najmłodszych.

Prowadzący: mgr Damian Mickiewicz, mgr Klaudia Piekarska, dr Agnieszka Pająk

Dni Otwarte w CBMiM PAN „Mój rodzic pracuje w PAN”

Zakład Chemii Bioorganicznej, w ramach drzwi otwartych w CBMiM PAN zorganizował w dniach 22-23 kwietnia 2015 roku, akcje pt.: "Mój rodzic pracuje w PAN", przygotowaną z myślą o dzieciach z klas I-III szkoły podstawowej. Dzieciom przedstawiono specyfikę pracy w laboratorium chemicznym i biochemicznym, a głównym punktem był pokaz kilkunastu prostych, aczkolwiek efektywnych eksperymentów chemicznych. Mali naukowcy mieli również okazję samodzielnie eksperymentować.

Dni Otwarte w CBMiM PAN zorganizowane przez Samorząd Doktorantów. Głównym celem przedsięwzięcia była popularyzacja wiedzy i osiągnięć naukowych w Instytucie, czemu towarzyszyły prezentacje naukowe cieszące się dużym zainteresowaniem uczniów gimnazjów oraz liceów.

Patenty

Patenty uzyskane w kraju w 2015 r.:

Patent Polski Nr 217979, 27.01.2015
Józef Drabowicz, Dorota Krasowska
Fosfinotlenek, sposób jego wytwarzania oraz jego zastosowanie.

Patent Polski Nr 217738, 10.02.2015
Ewa Piórkowska-Gałęska, Andrzej Gałęski, Zbigniew Kuliński
Sposób modyfikacji właściwości polilaktydu lub kompozycji zawierającej polilaktyd.

Patent Polski Nr 218907, 22.06.2015
Remigiusz Żurawiński, Marian Mikołajczyk, Marcin Cieślak, Julia Kaźmierczak-Barańska, Karolina Królewska
Pochodne alkilowe 7-hydroksy-15-deoksy-13,14-dihydro-19,20-dinor-18-(4-metylofenylo)-ent PGA₁, sposób ich wytwarzania oraz ich zastosowanie.

Patent Polski Nr 218608, 29.09.2015
Wojciech J. Stec, Olga Michalak, Barbara Nawrot
Nowy polimer deoksyrybonukleotydowy o właściwościach przeciwwirusowych i przeciwnowotworowych oraz monomery wyjściowe tego polimeru.

Patent Polski Nr 220620, 14.12.2015
Jerzy Łuczak, Tomasz Cierpiął, Piotr Kielbasiński
Pochodne sulforafanu, i ich prekursory oraz sposób ich wytwarzania.

Patent Polski Nr 219655, 17.11.2015
Witold Fortuniak, Urszula Mizerska, Julian Chojnowski, Teresa Basińska, Stanisław Słomkowski, Agnieszka Konopacka, Katarzyna Turecka, Władysław Werel
Elastomer silikonowy do ochrony przed patogennymi mikroustrojami oraz przemieszka tego elastomeru.

Patent Polski Nr 219355, 23.12.2015
Barbara Nawrot, Elżbieta Sochacka, Kinga Majchrzak, Wojciech J. Stec, Damian Smuga, Beata Kocoń-Rębowska
Modyfikowany deoksyrybozym 10-23 o ustabilizowanej odporności na hydrolizę oraz podwyższonej aktywności katalitycznej i sposób jego wytwarzania.

Zgłoszenia patentowe dokonane w UPRP w 2015 r.:

P.413297, 28.07.2015
Piotr Bałczewski, Barbara Nawrot, Marcin Cieślak, Julia Kaźmierczak-Barańska, Joanna Skalik
Zastosowanie medyczne soli tryfenylofosfoniowych.

P.414576, 27.10.2015
Tomasz Cierpiął, Piotr Kielbasiński, Jerzy Łuczak, K. Wiktorska, L. Śliwka, Z. Chilmończyk, M. Milczarek, K. Karwowska
Nowe analogi sulforafanu, ich prekursory, sposób ich wytwarzania, ich zastosowanie oraz postać farmaceutyczna.

Patenty uzyskane za granicą w 2015 r.:

Patent EP 2631232, 16.09.2015M. M. Krawiecka, Bożena Kuran, J. Kossakowski, Marcin Cieślak, Julia Kaźmierczak-Barańska, Karolina Królewska, Barbara Nawrot
Halogen derivatives of benzo[b]furans, possibly in the form of pharmaceutically acceptable salts, and use of halogen derivatives of benzo[b]furans.

Zgłoszenia patentowe dokonane za granicą w 2015 r.

EP.15460043, 13.08.2015
Piotr Bałczewski, Barbara Nawrot, Marcin Cieślak, Julia Kaźmierczak-Barańska, Joanna Skalik
Medical use of triphenylphosphonium salts.

Rozwój kadry naukowej w 2015 r.

Stopień doktora nauk chemicznych otrzymali:

Imię i nazwisko	Tytuł pracy doktorskiej	Dziedzina i zakres nadanego stopnia naukowego
Karolina Królewska	Poziom i mechanizm cytotoksyczności związków z grupy benzo[b]furanów i dikarboksyimidów w wybranych liniach komórek nowotworowych.	dr nauk chemicznych
Małgorzata Wojtczak-Michalska	The influence of chemical composition and nucleation on aliphatic-aromatic copolyesters' crystallization.	dr nauk chemicznych
Mateusz Gosecki	Nano- i mikrocząstki z polilaktydów, poli(tlenku etylenu) i ich pochodnych jako nośniki związków biologicznie czynnych.	dr nauk chemicznych
Joanna Skalik	Zastosowanie dialdehydów (hetero)aromatycznych w syntezie policyklicznych skondensowanych węglowodorów (hetero)aromatycznych jako materiałów dla optoelektroniki.	dr nauk chemicznych

Wszyscy doktoranci byli słuchaczami Studium Doktoranckiego Centrum.

W 2015 r. w ramach przyznanej dotacji celowej w wys. 90 830 zł realizowane były następujące badania naukowe i prace służące rozwojowi młodych naukowców i uczestników studiów doktoranckich:

1. Analiza wpływu egzosomów pochodzenia nowotworowego na poziom cytokin produkowanych przez komórki układu immunologicznego.
2. Oddziaływania poliglicydolu o liniowej topologii z organicznymi układami boranowymi.
3. Właściwości mechaniczne i mechanizmy deformacji biodegradowalnych mieszanin krystalicznego polilaktydu i ataktycznego poli(hydroksymaślanu).
4. Nowa metoda syntezy enancjomerycznie czystych stereoizomerów rosaprostolu.
5. Katalityczna funkcjonalizacja polimerów z wolnymi nieaktywowanymi grupami winylowymi.
6. Otrzymywanie nowych materiałów hybrydowych zawierających ugrupowania azowe.
7. Opracowanie metodologii otrzymywania kokryształów substancji czynnych farmakologicznie oraz analiza strukturalna z zastosowaniem spektroskopii Magnetycznego Rezonansu Jądrowego w ciele stałym.
8. Synteza i badania właściwości biodegradowalnych kopolimerów węglanu trimetylenowego i laktydów otrzymywanych metodą sprzęgania poliestrodioli z poliestrolami.
9. Zbadanie możliwości zarodkowania krystalizacji izotaktycznego polipropylenu w formie gamma pod wysokim ciśnieniem przez pochodną sorbitolu.

Działalność dydaktyczna

Studium Doktoranckie CBMiM PAN wg stanu na 31 grudnia 2015 r. liczyło 36 osób. W 2015 r. przyjęto 5 nowych uczestników. Wykłady w ramach Studium prowadziło 12 pracowników.

Kilku pracowników Centrum prowadziło wykłady monograficzne na wyższych uczelniach.

30 studentów łódzkich wyższych uczelni (w tym 3 zagranicznych) odbywało praktyki wakacyjne lub staże w laboratoriach CBMiM PAN. Pod kierunkiem pracowników naukowych z CBMiM PAN przygotowano 4 prace magisterskie.

Środowiskowe Laboratorium Fizykochemicznych Badań Związków Organicznych i Polimerów

Laboratorium Środowiskowe CBMiM PAN prowadzi działalność usługową wykonując widma NMR i MS na zlecenia zespołów badawczych Centrum oraz spoza Centrum. W 2015 r. wykonano ok 23 480 analiz /widm/ NMR dla potrzeb pracowników CBMiM PAN (w tym ok. 720 zleceń zewnętrznych) oraz około 1 600 widm masowych (w tym ok. 430 próbek z zewnątrz).

Pracownia Mikroanalizy

Pracownia Mikroanalizy wykonała w 2015 r. 3 190 analiz próbek (2 133 dla badaczy CBMiM PAN oraz 1 057 na podstawie zleceń zewnętrznych).

Biblioteka

W 2015 zakupiono 24 książki. Biblioteka dysponuje księgozbiorem liczącym 6 122 pozycji.

Bibliotekę odwiedziło ok. 450 osób, w tym 100 spoza Centrum. W bieżącej prenumeracie drukowanej było 16 tytułów czasopism krajowych i zagranicznych, zbiór czasopism liczy 11 012 woluminów; zbiory specjalne to 349 woluminów. Wykonano 4 417 stron kopii publikacji naukowych dla pracowników CBMiM PAN; na zewnątrz udostępniono 1 517 stron publikacji naukowych.

Oprócz tradycyjnych czasopism użytkownicy w Centrum oraz w Bibliotece mają dostęp on-line do wielu czasopism poprzez bazy danych różnych wydawców:

1. American Chemical Society (pełna kolekcja wraz z zasobami archiwalnymi)
2. Royal Society of Chemistry (pełna kolekcja z zasobami archiwalnymi + kolekcja książek)
3. Science Direct (Elsevier) - od roku 1995
4. Springer (pełna kolekcja z numerami archiwalnymi + kolekcja książek)
5. Wiley - Blackwell (pełna kolekcja od 1997 roku)
6. Dostęp on-line do czasopism Nature i Science
7. Chemical Abstracts (CAS) od 1907 roku na platformie SciFinder
8. Baza abstraktowo-bibliometryczna Web of Knowledge (WoK - od roku 1945; dawniej Science Citation Index Expanded) zawierająca Journal Citation Report (JCR) od roku 2007
9. EBSCO (12 baz, w tym 7 baz pełnotekstowych)
10. SCOPUS (baza abstraktów i cytowań)
11. „CYBRA” - Łódzka Regionalna Biblioteka Cyfrowa – zeskanowane prace doktorskie pracowników CBMiM PAN dostępne na komputerze w bibliotece

Centrum Zaawansowanych Technologii

CBMiM PAN bierze udział w pracach łódzkiego Centrum Zaawansowanych Technologii „BioTechMed”, które jest kierowane przez Politechnikę Łódzką. Uczestniczą w nim m.in. zespoły naukowe CBMiM PAN pod kierunkiem: prof. M. Mikołajczyka, prof. A. Gałęskiego, prof. S. Słomkowskiego, prof. B. Nawrot, prof. M. J. Potrzebowski.

Nagrody i wyróżnienia pracowników Centrum:

Prof. dr hab. Stanisław Penczek - Nagroda Fundacji na rzecz Nauki Polskiej w obszarze nauk chemicznych i o materiałach.

Prof. dr hab. Józef Drabowicz - nagroda MNiSzW za całokształt dorobku naukowego.

Prof. W. H. Midura, dr Adrian Zając - nagroda Rektora Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu III stopnia za osiągnięcia uzyskane w dziedzinie naukowo-badawczej w 2014 roku współautorstwo pracy: W. H. Midura, J. Ścianowski, A. Banach, A. Zając „*Asymmetric synthesis of cyclopropyl phosphonates using chiral terphenyl sulfonium and selenonium ylides*”. Tetrahedron: Asymmetry **25**, 1488-1493 (2014)

Dr Marcin Cieślak, mgr Julia Kaźmierczak-Barańska, dr Karolina Królewska, prof. dr hab. Barbara Nawrot - Nagroda Naukowa Trzeciego Stopnia za współautorstwo pracy pt.: „*Synthesis and Cytotoxic Properties of Halogen and Aryl-/Heteroarylpiperaziny Derivatives of Benzofurans*”, 26.10.2015, Warszawa, Polska (Warszawski Uniwersytet Medyczny), nagroda zespołowa: M. Krawiecka, B. Kuran, J. Kossakowski, M. Cieślak, J. Kaźmierczak-Barańska, K. Królewska, B. Nawrot.

Dr Karolina Królewska - wyróżniona rozprawa doktorska, CBMM PAN Łódź.

Mgr Maria Nowacka - nagroda imienia prof. Andrzeja Wiśniewskiego. Wyróżnienie dla młodych naukowców, którzy nie ukończyli 28-go roku życia i nie posiadają tytułu doktora, brali czynny udział w Zjeździe PTChem oraz posiadają dorobek naukowy udokumentowany publikacjami w uznanych periodykach naukowych z tzw. listy filadelfijskiej. 58 Zjazd PTChem i SITPChem, Gdańsk.

Mgr Maria Nowacka, stypendium CBMiM PAN dla najlepszego doktoranta IV roku Studium doktoranckiego CBMiM PAN.

Mgr Justyna Krajenta, dr hab. Andrzej Pawlak, prof. Andrzej Gałęski - nagroda za plakat „*Wytwarzanie nanowłókien polimerowych i nanokompozytów poprzez odkształcenie plastyczne kryształów polimerowych*”. VIII Kongres Technologii Chemicznej, Rzeszów 30.8.-4.9.2015.

Mgr Tomasz Pawlak - stypendium START Fundacji na rzecz Nauki Polskiej, za działalność naukowo-badawczą,

- laureat programu Mobilność Plus MNiSW, indywidualne stypendium krajowe na sfinansowanie 12-miesięcznego stażu naukowego za granicą. Ocenie podlegał dotychczasowy dorobek i wnioskowany projekt badawczy. Staż przewidziany na lata 2016 -2017 zostanie zrealizowany w grupie prof. Stevena Browna na Uniwersytecie w Warwick (Wlk. Brytania).

Mgr Piotr Paluch - stypendium START Fundacji na rzecz Nauki Polskiej, za działalność naukowo-badawczą.
- laureat programu stypendialnego dla doktorantów z woj. łódzkiego „Nauka drogą do biznesu” - za osiągnięcia naukowe.

Mgr Ewa Skorupska - laureatka programu stypendialnego dla doktorantów z woj. łódzkiego „Nauka drogą do biznesu” - za osiągnięcia naukowe.

- nagroda za najlepszy komunikat ustny na V Wyjazdowej Sesji Naukowej Doktorantów Politechniki Łódzkiej, (09 – 12.04.2015, Rogów).

- nagroda Dyrektora CBMiM PAN w Łodzi dla doktoranta za osiągnięcia naukowe;

- stypendium naukowe dla najlepszych doktorantów dla roku III CBMiM PAN w Łodzi (5 miesięcy - 10.2014-02.2015);

- stypendium naukowe dla najlepszych doktorantów dla roku IV CBMiM PAN w Łodzi (5 miesięcy - 10.2015-02.2016);

- dyplom za twórczy udział w promowaniu nauki, techniki i sztuki wśród młodzieży w ramach Festiwalu Nauki, Techniki i Sztuki od Rektora PŁ w imieniu Komitetu Organizacyjnego, Łódź 2015.

Mgr Justyna Śniechowska - laureatka programu stypendialnego dla doktorantów z woj. łódzkiego „Nauka drogą do biznesu” - za osiągnięcia naukowe.

Pracownicy CBMiM PAN wyróżnieni za zasługi dla Akademii Jana Długosza w Częstochowie na wniosek uczelni, pierwszego miejsca zatrudnienia wyróżnionych:

Prof. dr hab. Józef Drabowicz - Krzyż Kawalerski Orderu Odrodzenia Polski.

Prof. dr hab. Piotr Bałczewski - Złoty Krzyż Zasługi.

Prof. dr hab. Piotr Bałczewski - nagroda Rektora AJD III stopnia za szczególne osiągnięcia w pracy naukowej.

Prof. dr hab. Józef Drabowicz - nagroda indywidualna Rektora Akademii Jana Długosza I stopnia za szczególne osiągnięcia w pracy naukowej.

**SPRAWOZDANIE
Z DZIAŁALNOŚCI NAUKOWEJ**

Ważniejsze osiągnięcia działalności statutowej w 2015 roku

- Przeprowadzono pierwsze udane próby zastosowania enzymów - enereduktaz do wysoce stereoselektywnej redukcji serii winylofosfonianów dialkylowych.
- Synteza kationowych dendrymerów fosforowych trzeciej i czwartej generacji zawierających grupy amoniowe na zewnętrznej sferze cząsteczki oraz anionowych dendrymerów fosforowych 3-ciej i 4-tej generacji z grupami karboksylowymi umieszczonymi na zewnętrznej sferze cząsteczki.
- Określono stopień toksyczności dla mikroorganizmów (bakterie Gram+ i Gram- oraz grzyby *Candida albicans*), czwartorzędowych bromków amoniowych i fosfoniowych, stosowanych w masowych ilościach w przemyśle jako czynnika wskazującego stopień zagrożenia dla środowiska naturalnego i wyższych organizmów roślinnych oraz zwierzęcych.
- Opracowano pierwszą syntezę czterech enancjomerycznie czystych stereoisomerów rosaprostolu – stosowanego klinicznie leku przeciwrzodowego żołądka o nazwie ROSAL.
- Uzyskano wysokie wydajności (do 93%) i nadmiary enancjomeryczne (do 92%) produktów asymetrycznego azirydynowania nienasyconych aldehydów, prowadzonego w obecności opracowanych wcześniej chiralnych katalizatorów heteroorganicznych.
- Opracowano procedury syntezy i rozdziału na enancjomery racemicznego kwasu *t*-butylo-4-trifluorometylofenylofosfinowego i jego selenowego analogu.
- Opracowano procedury syntezy 9-antracenylo-*t*-butylochlorofosfiny, jej konwersji do racemicznego tlenku fosfiny *t*-butylo-9-antracenylowej oraz zsyntetyzowano i wyizolowano nietrwały chemicznie kwas *t*-butylo-9-antracenylofosfinowy.
- Opracowano syntezę dwóch racemicznych bicyklicznych nienasyconych laktonów, podstawionych w pozycji 4 grupą fenylową i tert butylową.
- Otrzymano nowe enancjomeryczne kwasy α -amino- β -hydroxy- i β -amino- γ -hydroxypropylofosfonowe.
- Synteza 3',3'-bis(trifluorometylo)-3H,3'H-1,1'-spirobis(izobenzofuran)-3-onu jako nieoczekiwanego produktu reakcji *orto*-lito-O-litopochodnej alkoholu heksafluorokumylowego z N-*t*-butylosulfonyloftalimidem.
- Wyjaśniono mechanizm tworzenia cyklicznego sultinu z odpowiednich o-sulfinylowych pochodnych alkoholu heksafluorokumylowego na przykładzie alkoholu o-(heksadecylosulfinylo)heksafluorokumylowego metodą GC-MS.
- W ramach badania struktury przestrzennej analogów A_{P_4A} w kompleksach z białkami, przeprowadzono krystalizację kompleksu białka HINT1 z niehydrolizowalnym analogiem A_{P_4A} – związkiem JB419. Analiza danych potwierdziła, że białko hHINT1 preferencyjnie wiąże się z diastereomerem JB419 o konfiguracji $S_P S_P$, jednym z 8 znajdujących się w mieszaninie użytej do kokryształizacji. Dane strukturalne kompleksu hHINT1/JB419 zostały zdeponowane w bazie PDB (kod 4ZKL) oraz opisane w publikacji wysłanej do *Int. J. Biol. Macromol.*: R. Dolot., R. Kaczmarek, A. Sęda, A. Krakowiak, J. Baraniak, B. Nawrot, Crystallographic studies of the complex of human HINT1 protein with a non-hydrolyzable analog of A_{P_4A} .
- Wykazano użyteczność związków typu skoniugowanych oligoelektrolitów do barwienia egzosomalnych pęcherzyków komórkowych. Do badań przeprowadzonych za pomocą mikroskopii fluorescencyjnej i cytometrii przepływowej (FACS) zastosowano sondy fluorescencyjne zsyntezowane na bazie styrylostilbenu. Badania pokazały uniwersalność stosowanych znaczników fluorescencyjnych do efektywnego wybarwiania struktur błoniastych całych komórek eukariotycznych (drożdże, komórki ssacze) i wydzielanych z tych komórek pęcherzyków egzosomalnych. Wyniki podsumowano w publikacji: L. Czernek, A. Chworos, M. Duechler, The uptake of extracellular vesicles is affected by the differentiation status of myeloid cells, *Scand. J. Immunol.*, 2015, 82(6), 506-14.

- W ramach badań nad nowymi właściwościami białek z rodziny HIT zbadano aktywność hydrolityczną białka Fhit w stosunku do wybranych dinukleotydów zawierających internukleotydowe wiązanie fosforanowe lub tiofosforanowe oraz 5',5"-di-(tiofosforanowych) analogów dinukleozydtrifosforanów. Metodą RP-HPLC wyznaczono stałe szybkości reakcji [nmol/min/μg białka] katalizowanej za pomocą białka Fhit, a także na podstawie wyników trawień za pomocą nukleazy svPDE wyznaczono konfigurację względną atomu fosforu w grupach tiofosforanowych poszczególnych izomerów. Stwierdzono, że dimery fosforylowane na 5'-końcu, o konfiguracji R_P na stereogenicznym atomie fosforu są lepszymi substratami dla badanych enzymów FHIT i svPDE.
- We współpracy Dr X. Yangiem z AM Biotech, Houston, Teksas, przeprowadzono badania związane z charakterystyką właściwości biologicznych i fizykochemicznych nowych modyfikowanych cząsteczek siRNA. Badania CD kompleksu modyfikowanego aptameru RNA z alfa-trombiną oraz samej alfa-trombiny wykazały zmiany konformacyjne aptameru po związaniu się z białkiem; nie zaobserwowano zmian konformacyjnych białka. Wyniki te włączono do publikacji przesłanej do ewaluacji: N. Dinuka Abeydeera, Martin Egli, Nehemiah Cox, Karen Mercier, Nascimento Conde, Pradeep S. Pallan, Daniella M. Mizurini, Małgorzata Sierant, Fatima-Ezzahra Hibti, Tom Hassell, Tianzhi Wang, Fengwu Liu, Hongmin Liu, Carlos Martinez, Anil K. Sood, Chiraz Frydman, Robson Monteiro, Richard Gomer, Barbara Nawrot, Xianbin Yang. Evoking picomolar binding in RNA by a single phosphorodithioate linkage.
- Zbadano teoretycznie oraz na drodze modelowania komputerowego Monte Carlo oraz metodą całkowania numerycznego równań różniczkowych całą gamę procesów kopolimeryzacji odwracalnej wykazujących cechy kopolimeryzacji azeotropowej.
- Opracowano nowy model reakcji wymiany segmentalnej w polimeryzacji L-Laktydu katalizowanej oktanianem cyny(II).
- Za pomocą obliczeń teoretycznych DFT scharakteryzowano drogi reakcji prowadzących do enkapsulacji jonów (Li⁺, Na⁺, F⁻, Cl⁻, H⁺ i H⁻) wewnątrz klatek silseskwioxanowych o różnych rozmiarach.
- Opracowano metodę polikondensacji digliceryny i poligliceryny z H₃PO₄ prowadzącą do odwracalnie degradujących się żeli.
- Opracowano metodę umożliwiającą jednoczesny („w jednej rurce NMR”) pomiar konwersji monomeru, Mw i Mn oraz oznaczenie struktury polimeru w polimeryzacji laktydu.
- Otrzymano serię makromonomerów PCL zdolnych do reakcji sieciowania w wyniku reakcji „click” z użyciem bis(triazolinodionów).
- Opracowano metodę syntezy liniowych kopolimerów amfifilowych, diblokowych, zawierających bloki polistyrenu i poliglicydołu.
- Opracowano syntezę oligomultycyklosiloksanów jako środków rozgałęziających i sieciujących w polimeryzacji cyklosiloksanów.
- Opracowano makroporowate mikrosfery zawierających srebro jako preparaty bakteriobójcze.
- Metodą zdalnej plazmy wodorowej, uzyskano i zbadano uwodornione warstwy CVD z dimetoksymetylowodorosilanu (DMMS). Wytworzone w szerokim zakresie temperatur (30-350 °C) warstwy charakteryzują się właściwościami odpowiadającymi polimerom krzemotlenowęglowym po właściwości charakterystyczne dla warstw krzemionkowych.
- Zbadano wpływ modyfikacji powierzchni krzemionki na jej dyspersję w matrycy PP i właściwości nanokompozytów PP-krzemionka.
- Wykazano wpływ modyfikacji mieszanin polimerowych TPE/LDPE przy użyciu nanowłókien PTFE na znaczącą poprawę wytrzymałości w stanie stopionym oraz sprężystości.
- Metodami TOA (analiza termo optyczna) i mikroskopii sił atomowych (AFM) zbadano przejścia fazowe wybranych materiałów polimerowych i organicznych pod wpływem zmian temperatury.

- Wytworzono wysokowytrzymały biodegradowalny laminat z PLA ze wzmocnieniem z wysokoorientowanych taśm z PLA.
- Zaobserwowano wzrost temperatury krystalizacji poli(adypinianu-ko-tereftlanu butylenu) wskutek poddania odkształceniom ścinającym w stanie stopionym.
- Wykazano, że obecność odpowiednich środków zarodkujących lub nanonapełniaczy takich jak nanorurki węglowe i nanowłókna politetrafluoroetyleny, podwyższa temperaturę krystalizacji nieizotermicznej izotaktycznego polipropylenu pod wysokim ciśnieniem.
- Wykazano, że 1,3:2,4-bis(3,4-dimetylobenzylideno)sorbitol, zarodkujący formę alfa izotaktycznego polipropylenu pod ciśnieniem atmosferycznym, dodany w odpowiednim stężeniu, powoduje pod wysokim ciśnieniem krystalizację gamma-polipropylenu w postaci drobnoziarnistej.
- Opracowano nowatorskie wykorzystanie wysokorozdzielczej spektroskopii NMR w ciele stałym (^{13}C , ^{15}N i ^{19}F NMR) w analizie struktury i dynamiki molekularnej polimorficznych form linezolidu.
- Opracowano metody oznaczania mas substancji niskocząsteczkowych za pomocą spektrometrii mas, gdzie jako matryc w technice MALDI wykorzystano układy porfiryne.
- Wykazano, że niewielkie różnice w stereochemii diketopiperazyn Tyr-Ala i Tyr-D-Ala mają znaczący wpływ na ich samoorganizację w ciele stałym oraz własności fizyczne utworzonych mikro- i nanosystemów.

Sprawozdanie z działalności naukowej Zakładu Chemii Heteroorganicznej

1. Chemia i stereochemia połączeń heteroorganicznych o różnych stopniach koordynacji.

1.1. Obliczenia trwałości wybranych struktur sulfuranowych.

Cel badania: Celem podjętych obliczeń było potwierdzenie propozycji tworzenia struktur sulfuranowych jako związków pośrednich w wybranych reakcjach podstawienia nukleofilowego przy stereogenicznym atomie siarki.

Opis realizowanych prac: Wykonane zostały obliczenia tworzących się odpowiednich struktur sulfuranowych w reakcjach hydrolizy optycznie czynnych soli dialkoksylsulfoniowych. Zastosowano metody: Density Functional Theory: B3LYP-D3/6-311-G(2dp)/B3LYP/6-31G(d).

Opis najważniejszych osiągnięć: Potwierdzenie tendencji grup alkoksylowych do zajmowania pozycji apikalnych w dwupiramidzie trygonalnej powstającego sulfuranu. Oszacowanie różnicy między apikofilowością grupy metoksylowej i tert-butoksylowej (0,8 kcal/mol na korzyść tej ostatniej).

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wyniki zostały zaprezentowane w formie plakatu na międzynarodowej konferencji i zostaną włączone do przygotowywanej publikacji oryginalnej (B. Bujnicki + M. Cypryk).

1.2. Nowe optycznie czynne tio i selenokwasy fosfinowe jako chiralne odczynniki solwujące spektroskopii NMR, ligandy w kompleksowych połączeniach z wybranymi związkami metaloorganicznymi oraz katalizatory organiczne.

Cel badania: Celem realizowanych eksperymentów było opracowanie procedur syntezy racemicznych kwasów *t*-butyloarylotiofosfinowych i ich selenowych analogów o rozbudowanych podstawinkach aromatycznych oraz próby rozdzielenia otrzymanych mieszanin racemicznych na enancjomery.

Opis realizowanych prac: Wykonane prace o charakterze syntetycznym doprowadziły do wyizolowania i scharakteryzowania 9-antracenylo-*t*-butylochlofosfiny, jej konwersji do racemicznego fosfinotlenku *t*-butylo-9-antracenylofosfinowego oraz otrzymania racemicznego kwasu *t*-butylo-(9-antracenylo)tiofosfinowego. Stwierdzono, że otrzymany kwas tworzy trwałą sól z trietyloaminą. Wykonane próby izolacji wolnego tiokwasu wykazały jego nietrwałość. Próby rozdzielenia racematu przez diastereomeryczne sole z użyciem α -fenyloetyloaminy okazały się nieskuteczne. Opracowanie metody syntezy kwasu *t*-butylo-4-trifluorometylofenyloselena fosfinowego oraz warunków rozdzielenia kwasów: *t*-butylo-4-trifluorometylofenylofosfinowego i *t*-butylo-4-trifluorometylofenyloselena fosfinowego na enancjomery. Zrealizowano pomiary testujące działanie otrzymanych optycznie czynnych kwasów: *t*-butylo-(1-naftylo)tiofosfinowego oraz kwas *t*-butylo-(*p*-metoksyfenylo)tiofosfinowego jako chiralnych odczynników solwujących w odniesieniu do opisanego w literaturze kwasu *t*-butylo-fenylofosfinowego.

Opis najważniejszych osiągnięć: Izolacja nieopisanych w literaturze chemicznej nowych chiralnych tiokwasów *t*-butyloarylofosfinowych i ich selenowych analogów oraz wykazanie, że rozbudowa układu aromatycznego prowadzi do wzrostu ich efektywności jako chiralnych odczynników solwujących

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wyniki zostały częściowo opisane w jednej publikacji oryginalnej i omówione w publikacji o charakterze przeglądowym oraz zaprezentowane w formie komunikatu i plakatu na krajowej i międzynarodowej konferencji oraz zostaną włączone do innych publikacji oryginalnych aktualnie przygotowywanych do wysłania.

1.3. Syntezy związków ze stereogenicznym atomem siarki funkcjonalizowanych podstawnikami pochodnymi alkoholi kumylowych i benzyloowych.

Cel badania: Celem realizowanych eksperymentów było opracowanie procedur syntezy nowych optycznie czynnych związków ze stereogenicznym atomem siarki, w których obecność podstawnika pochodnego alkoholi kumylowych lub benzyloowych stwarza możliwość tworzenia struktur hiperwalentnych.

Opis realizowanych prac: Jako jedyny produkt reakcji *orto*-lito-O-litopochodnej alkoholu heksafluorokumylowego z *N-t*-butylosulfenyloftalimidem wyizolowano nieoczekiwane 3',3'-bis(trifluorometylo)-3*H*,3'*H*-1,1'-spirobis(izobenzofuran)-3-on. Jego strukturę określono w oparciu o analizy spektralne oraz XRD otrzymanego produktu. Zaproponowano mechanizm tworzenia oraz przeprowadzono eksperymenty nad sprawdzeniem użyteczności powyższej reakcji w odniesieniu do analogicznych substratów (np. alkoholu *o*-bromobenzylowego).

Opis najważniejszych osiągnięć: Nieoczekiwany przebieg reakcji *orto*-lito-O-litopochodnej alkoholu heksafluorokumylowego z *N-t*-butylosulfenyloftalimidem. Wyjaśnienie mechanizmu tworzenia

cyklicznego sultinu z odpowiednich *orto*-sulfinylowych pochodnych alkoholu heksafluorokumylowego na przykładzie alkoholu *orto*-(heksadecylosulfinylo)heksafluorokumylowego metodą GC-MS.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wyniki zaprezentowano w formie wykładu i plakatu na krajowej i międzynarodowej konferencji naukowej. Zostaną one również włączone do publikacji oryginalnych aktualnie przygotowywanych do wysłania.

1.4. Biologicznie aktywne bicykliczne nienasycone laktony.

Cel badania: Celem eksperymentów było opracowanie procedur syntezy wybranych bicyklicznych nienasyconych laktonów o spodziewanej aktywności biologicznej.

Opis realizowanych prac: Opracowano syntezę dwóch racemicznych bicyklicznych nienasyconych laktonów, podstawionych w pozycji 4 grupą fenylową i *tert* butylową.

Opis najważniejszych osiągnięć: Wykazanie syntetycznego potencjału enolofosforanów jako użytecznego bloku budulcowego.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wyniki zostały częściowo opisane w jednej publikacji oryginalnej [*Tetrahedron: Asymmetry*, 26, 876–883 (2015)] oraz zaprezentowane w formie plakatu na krajowej i międzynarodowej konferencji naukowej oraz zostaną włączone do innych publikacji oryginalnych aktualnie przygotowywanych do wysłania.

1.5. Synteza chiralnych *cis*-1,2-aminoalkoholi w oparciu o enolofosforany.

Cel badania: Synteza optycznie czynnych cyklicznych *cis*-1,2-aminoalkoholi - pochodnych fenantrenu i α -metyloindanonu.

Opis realizowanych prac: Syntetyzowano enolofosforany, pochodne fenantrenu i α -metyloindanonu z różnymi podstawnikami, zarówno alkoksylowymi jak i aryloksylowymi przy atomie fosforu. Prowadzono reakcje utleniania otrzymanych związków stosując różne chiralne odczynniki utleniające. Powstałe α -hydroksyketony przekształcano w odpowiednie oksymy, które następnie redukowano do 1,2-aminoalkoholi.

Opis najważniejszych osiągnięć: Opracowano stereoselektywną metodę redukcji badanych oksymów α -hydroksyketonów do odpowiednich 1,2-aminoalkoholi. Potwierdzono za pomocą analizy rentgenostrukturalnej konfigurację absolutną na asymetrycznym atomie węgla w oksymie będącym pochodną fenantrenu.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Przygotowywana publikacja.

1.6. Czwartorzędowe sole i ciecze jonowe.

Cel badania: Synteza i badania biologiczne czwartorzędowych soli i cieczy jonowych.

Opis realizowanych prac: Badanie toksyczności bromków amoniowych i fosfoniowych dla szczepów bakteryjnych i grzybów.

Opis najważniejszych osiągnięć: Zakończono badania, wykazując zależności pomiędzy strukturą chemiczną badanych związków a ich toksycznością dla bakterii Gram-plus i Gram-minus oraz grzybów *Candida albicans*. Stopień toksyczności dla drobnoustrojów badanych związków, stosowanych w masowych ilościach w przemyśle, jest czynnikiem wskazującym stopień zagrożenia dla środowiska naturalnego i wyższych organizmów roślinnych oraz zwierzęcych.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja w przygotowaniu.

2. Achiralne i chiralne reagenty i katalizatory heteroorganiczne w syntezie produktów biologicznie czynnych

2.1. Chiralne kwasy aminofosfonowe i ich pochodne.

Cel badania: Synteza enancjomerycznie czystych kwasów α -amino- β -hydroxy- i α,β -diaminoetylo- oraz β -amino- γ -hydroxy- i β,γ -diaminopropylofosfonowych.

Opis realizowanych prac: Syntezy w/w związków oparto na tzw. „metodzie sulfinimowej”. Otrzymano odpowiednią, enancjomerycznie czystą sulfiniminę pochodną aldehydu ftalimidooctowego i (+)-(S)-sulfonamidu *t*-butyloвого i poddano ją reakcji nukleofilowej addycji z anionami fosforynów (MeO)⁻, (EtO)⁻ i (*i*-PrO)⁻ oraz z anionem metylofosfonianu dietylowego, otrzymując odpowiednie addukty w postaci mieszaniny diastereoizomerów. Jedynie w przypadku adduktu otrzymanego z fosforynem dimetylowym udało się wyodrębnić pojedynczy diastereoizomer, który okazał się jednak niereaktywny w reakcjach hydrolizy kwasowej, metanolizy katalizowanej kwasem trifluoroctowym i reakcji redukcji układu ftalimidowego za pomocą hydrazyny. Otrzymano odpowiednią, enancjomerycznie czystą sulfiniminę pochodną aldehydu cynamonyloвого i poddano ją reakcji addycji z anionami fosforynu i metylofosfonianu dietylowego. Wyodrębnilo pojedyncze diastereoizomery, poddano je ozonolizie i redukcji, otrzymując odpowiednie (S_SR_C)-[2-hydroxy-1-(*p*-toliliosulfinyloaminoetylo)]- i (S_SR_C)-[3-hydroxy-2-(*p*-toliliosulfinyloaminopropylo)]-fosfoniany dietylowe. Ich kwasowa hydroliza doprowadziła do odpowiednich kwasów α -amino- β -hydroxyetylo- i α -amino- β -hydroxypropylofosfonowych.

W/w hydroksyfosfoniany poddano reakcji mesylowania do odpowiednich metanosulfonianów, które będą przekształcane w odpowiednie kwasy diaminofosfonowe i fosfonodietenotriaminy.

Opis najważniejszych osiągnięć: Otrzymano nowe enancjomeryczne kwasy α -amino- β -hydroksy- i β -amino- γ -hydroksypropanofosfonowe.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wyniki zostaną opisane w przygotowanym zgłoszeniu patentowym i publikacji oryginalnej.

2.2. Nowa synteza izoterreiny.

Cel badania: Badania nad syntezą izoterreiny przy użyciu opracowanej wcześniej metody wykorzystującej przemianę *bis*- β -ketofosfonianów.

Opis realizowanych prac: W badanym podejściu wykorzystano optycznie czynny kwas L-winowy. W tym celu przeprowadzona została synteza odpowiedniego *bis*- β -ketofosfonianu w reakcji O,O-benzylidenu pochodnej estru metylowego kwasu L-winowego z litopochodną metylofosfonianu dimetylowego. Doprowadziła ona do powstania pożądanego produktu z niemal ilościową wydajnością. Następnym etapem była reakcja cyklizacji otrzymanego związku na drodze wewnątrzcząsteczkowej reakcji Hornera z utworzeniem O,O-benzylidenu pochodnej 4,5-dihydroksy-3-metylofosforylocyklopentenonu. W tej reakcji nastąpiła zmiana względnej konfiguracji na atomach węgla C-4 i C-5 z *trans* na *cis* (to był warunek zamknięcia się drugiego pierścienia). Otrzymany fosfonian posłużył do wprowadzenia łańcucha olefinowego w reakcji Hornera z aldehydem octowym. Powstawała wyłącznie olefina o konfiguracji *trans*. Ostatnim etapem było usunięcie ugrupowania acetalowego na drodze kwasowej hydrolizy. Porównanie skręcalności właściwej otrzymanej izoterreiny z enancjomerycznie czystą próbką wskazało na daleko posuniętą racemizację otrzymanej pochodnej.

Opis najważniejszych osiągnięć: Uzyskane wyniki pozwolą na zaproponowanie pełnego mechanizmu cyklizacji *bis*- β -ketofosfonianów

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Przygotowanie publikacji.

2.3. Synteza stereoizomerów rosaprostolu.

Cel badania: Opracowanie metody syntezy dwóch stereoizomerów rosaprostolu.

Opis realizowanych prac: Związkiem wyjściowym w syntezie stereoizomerów rosaprostolu był diastereomerycznie czysty acetal kamfory i 3-(metylo(dimetoksyfosforylo))-4,5-dihydroksycyklopent-2-enonu, który w reakcji Hornera-Wadswortha-Emmonsa z pentanalem przekształcony został w dienon. W wyniku stereospecyficznego redukcji dwóch sprzężonych wiązań podwójnych C=C przeprowadzonej przy pomocy wodoru w obecności 5%-Pd/C, otrzymano odpowiedni nasycony keton. Redukcyjna deacetalizacja tego związku pod wpływem amalgamatu glinu, a następnie eliminacja cząsteczki wody z powstałego alkoholu doprowadziły do otrzymania 4-heksylocyklopent-2-enonu. Łańcuch alkilowy w pozycji α do grupy karbonylowej wprowadzony zostały w reakcji kondensacji aldolowej z 7-oksoheptanianem metylu. Powstała mieszanina diastereomerycznych *syn* i *anti* alkoholi poddana została reakcji z chlorkiem mesylu w obecności trietyloaminy. Utworzone mesylany pod wpływem obojętnego tlenku glinu ulegały eliminacji dając krzyżowo sprzężony dienon. Redukcja dwóch wiązań podwójnych C=C, hydroliza enzymatyczna grupy estrowej a następnie redukcja grupy karbonylowej w cyklopentanonie pozwoliły na otrzymanie enancjomerycznie czystego stereoizomeru rosaprostolu. Związek ten został przekształcony w stereoizomer rosaprostolu o przeciwnej konfiguracji absolutnej na atomie węgla związanym z grupą hydroksylową w reakcji Mitsunobu.

Opis najważniejszych osiągnięć: Pierwsza synteza dwóch enancjomerycznie czystych stereoizomerów rosaprostolu.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja *J. Org. Chem.* **80** (19), 9798–9802 (2015).

2.4. Synteza nowego bloku budulcowego.

Cel badania: Opracowanie metody syntezy nowego bloku budulcowego w syntezie prostanoidów - (4*R*,5*R*)-dihydroksy-2-(dimetoksyfosforylo)cyklopent-2-enonu.

Opis realizowanych prac: Przyjęta strategia zakładała otrzymanie wspomnianego chiralnego bloku z optycznie czynnego, handlowo dostępnego kwasu izoaskorbinowego. Związek ten w wyniku reakcji z wodą utlenioną przekształcony został w 2,3-dihydroksybutyrolakton, który po zabezpieczeniu grup hydroksylowych w postaci acetonidu poddany został reakcji z anionem metylofosfonianu dimetylu dając zamiast oczekiwanego β -ketofosfonianu hemiacetal będący wynikiem addycji anionu metylofosfonianu dimetylu do grupy karbonylowej. Związek ten w środowisku zasadowym ulegał przekształceniu w β -ketofosfonian niemniej reakcji tej towarzyszyła epimeryzacja na węglu γ . Próby utlenienia terminalnej grupy hydroksylowej do grupy aldehydowej z udziałem różnych reagentów zakończyły się niepowodzeniem. Podobnym wynikiem zakończyła się próba zamknięcia pierścienia cyklopentanonowego na drodze katalizowanej octanem rodu karbenoidowej cyklizacji odpowiedniego α -diaz- β -ketofosfonianu otrzymanego z β -ketofosfonianu w wyniku zabezpieczenia terminalnej grupy hydroksylowej w postaci eteru silylowego a następnie reakcji z azydkiem tosyłu.

Opis najważniejszych osiągnięć: Otrzymanie enancjomerycznie czystego produktu o zakładanej strukturze.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja *Org. Biomol. Chem.* **13**, 807-816 (2015).

2.5. Nowe makromolekularne produkty biologicznie czynne.

Cel badania: Opracowanie syntezy nowych makromolekularnych produktów biologicznie czynnych w oparciu o wytworzone nowe reagenty.

Opis realizowanych prac: Opracowano prostą i efektywną metodę syntezy nowych, rozpuszczalnych w wodzie, dendrymerów polianionowych różniących się wielkością i strukturą, posiadających na powierzchni wolne grupy fosfonianowe. Dendrymery te składające się z poliestrowych ugrupowań tiofosforanowych i 1,3,5-benzenotrikarboksylowych mogą znaleźć potencjalne zastosowanie w naukach biomedycznych, jako środki przeciwwirusowe oraz jako użyteczne makrocząsteczkowe modele dla funkcjonalizacji powłok nanocząstek superparamagnetycznych tlenków żelaza (SPIOs). Mogą one znaleźć zastosowanie w terapii hipertermalnej i diagnostyce medycznej (obrazowanie metodą rezonansu magnetycznego).

Opis najważniejszych osiągnięć: Związki docelowe otrzymano z wysoką wydajnością stosując zarówno rozbieżną, jak i zbieżną strategię syntezy z uprzednio otrzymanych fosforoorganicznych monomerów. Kwas 3,5-bis(dimetoksyfosfonylo)metyloj benzoesowy posłużył jako kluczowy prekursor polianionowej powierzchni dendrymerów.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja: *Tetrahedron Lett.* **55**, 7161-7164 (2015).

2.6. Synteza viologenowych dendrymerów fosforowych.

Cel badania: Badanie toksyczności otrzymanych związków na liniach komórkowych.

Opis realizowanych prac: Przeprowadzone zostały badania wpływu polimerów dendrytycznych na modelowe membrany biologiczne.

Opis najważniejszych osiągnięć: Określono oddziaływanie dendrymerów na wybrane membrany biologiczne.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja: *J. Polym. Res.* **22**, 184 (2105).

2.7. Synteza dendrymerów fosforowych 3-ciej i 4-tej generacji.

Cel badania: Synteza kompleksów kationowych dendrymerów fosforowych z różem bengalskim, oraz kompleksów dendrymerów anionowych z błękitem metylenowym.

Opis realizowanych prac: Synteza kationowych dendrymerów fosforowych 3-ciej i 4-tej generacji posiadających grupy amoniowe na zewnętrznej sferze cząsteczki, oraz anionowych dendrymerów fosforowych 3-ciej i 4-tej generacji z grupami karboksylowymi umieszczonymi na zewnętrznej sferze cząsteczki.

Opis najważniejszych osiągnięć: Otrzymano kompleksy kationowych i anionowych dendrymerów fosforowych z błękitem metylenowym i różem bengalskim stosowanych w medycynie jako fotosensybilizatorów. Badania były realizowane we współpracy z prof. J-P. Majoralem LCC w Tuluzie (Francja) i prof. B. Klajnert-Maculewicz z Uniwersytetu Łódzkiego.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacje: *Int. J. Pharm.* **492**, 266-274 (2015) oraz wysłana do *Anal. Bioanal. Chem.*

2.8. Katalityczne asymetryczne azirydynowanie nienasyconych aldehydów.

Cel badania: Poszerzenie zakresu stosowalności zsyntetyzowanych uprzednio chiralnych katalizatorów heteroorganicznych.

Opis realizowanych prac: Zbadano reakcję azirydynowania szeregu nienasyconych aldehydów arylowych i alkilowych znanymi odczynnikami azirydynującymi w obecności zsyntetyzowanych w Zakładzie trójfunkcyjnych katalizatorów chiralnych zawierających grupę hydroksylową, stereogeniczną grupę sulfinyłową i ugrupowanie chiralnej aminy. Współpraca z Wydziałem Chemii UŁ.

Opis najważniejszych osiągnięć: Uzyskano chiralne produkty – odpowiednie azirydyny z wydajnościami do 93%, stosunku diastereomerów do 15:1 i o nadmiarach enancjomerycznych do 92%.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja *ChemCatChem* **7**, 3589-3592 (2015).

3. Nowe połączenia heterometaloorganiczne: badania struktury, reaktywności i zastosowanie

3.1. Funkcjonalizowane cyklopropany jako ligandy w kompleksach z metalami.

Cel badania: Badania nad wykorzystaniem funkcjonalizowanych cyklopropanów jako ligandów w kompleksach z metalami.

Opis realizowanych prac: Stosując jako związek modelowy cyklopropylowy 1,2-diester opracowano warunki przekształcenia go w odpowiednią 1,2-diaminę. W pierwszym etapie przez działanie

kompleksu trimetyloglinu wobec pirolidyny otrzymany został diamid, który następnie został zredukowany za pomocą fenylosilanu z 4% molowym KOH. Zastosowanie tej metodologii do enancjomerycznie czystego 1,2-dimetoksykarbonylo-3-*p*-tolilosulfinylocyklopropanu prowadziło z wysoką wydajnością do odpowiedniej diaminowej pochodnej cyklopropylowego sulfotlenku. W celu sprawdzenia możliwości kompleksowania otrzymanych związków poddano obie diaminy reakcji z rutenowym kompleksem *p*-cymenu.

Opis najważniejszych osiągnięć: Otrzymano kompleksy cyklopropylowych diaminy z rutenem. Stwierdzono, że w przypadku związku modelowego w skład kompleksu wchodzi 2 cząsteczki diaminocyklopropanu, natomiast w drugim przypadku w kompleksie obecna jest jedna cząsteczka cyklopropylowego sulfotlenku. Niestety grupa sulfinylowa nie koordynuje z metalem.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja po zakończeniu badań.

4. Biokatalityczne metody syntezy chiralnych połączeń heteroorganicznych i badanie ich struktury.

4.1. Enzymatyczna synteza enancjomerów sulfotlenków acetoksymetylowych.

Cel badania: Zbadanie kinetycznego rozdziału racemicznych sulfotlenków arylowo acetoksymetylowych przy użyciu enzymów hydrolitycznych.

Opis realizowanych prac: Przeprowadzono enzymatyczne reakcje hydrolizy sulfotlenków acetoksymetylowo arylowych w obecności szeregu dostępnych hydrolaz w różnych rozpuszczalnikach (zarówno w buforach jak i w rozpuszczalnikach organicznych bez dodatku wody, wykorzystując jedynie wodę konstytucyjnie związaną z enzymami) w warunkach kinetycznego rozdziału. Otrzymano optycznie czynne sulfotlenki z różnymi wydajnościami chemicznymi i o różnych nadmiarach enancjomerycznych.

Opis najważniejszych osiągnięć: Uzyskano oczekiwane związki z wydajnościami do 50 % i o enancjomerycznych nadmiarach do 98%. Określono ich absolutną konfigurację za pomocą korelacji chemicznej i widm CD.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja *J. Mol. Catal. B – Enzym.* **118**, 23-28 (2015).

4.2. Zastosowanie enereduktaz do stereoselektywnej redukcji winylofosfonianów.

Cel badania: Sprawdzenie możliwości użycia natywnych enereduktaz w nieznaną dotąd redukcji wiązania podwójnego w winylowych pochodnych heteroorganicznych.

Opis realizowanych prac: Zsyntetyzowano serię podstawionych prochiralnych winylofosfonianów dialkylowych. Przeprowadzono próby ich stereoselektywnej redukcji za pomocą enzymów - enereduktaz (praca wykonana we współpracy z Uniwersytetem w Graz, Austria).

Opis najważniejszych osiągnięć: Pierwsze udane próby wysoce stereoselektywnej redukcji otrzymanych substratów za pomocą enereduktaz.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Przygotowywana publikacja.

5. Nowe materiały do zastosowań w organicznej elektronice.

5.1 Synteza fosfoli.

Cel badania: Opracowanie metody syntezy diformylodibenzofosfolu oraz dibromodiformylodibenzofosfolu.

Opis realizowanych prac: 4,4'-Diamino-1,1'-bifenyl przekształcono w reakcji Sandmeyera w sól bisdiazoniową a następnie w odpowiedni 4,4'-dibromek. Wymiana 2 atomów bromu na lit a następnie reakcja z dichlorofenylofosfiną w atmosferze tlenowej dostarczyła odpowiedni tlenek dibenzofosfolu.

Opis najważniejszych osiągnięć: Synteza dibromopodstawionego tlenku dibenzofosfolu.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Produkt reakcji posłuży do syntezy diformylodibenzofosfolu oraz dibromodiformylodibenzofosfolu, jako fosforoorganicznych substratów w opracowanej w Zespole nowej modyfikacji reakcji Friedela-Craftsa prowadzącej do poliacenów.

Sprawozdanie z działalności naukowej Zakładu Chemii Bioorganicznej

6. Synteza i właściwości P-modyfikowanych analogów nukleotydów i oligonukleotydów

6.1. Określenie stereochemii katalizowanej związkami miedzi reakcji syntezy hypofosforanów na drodze sprzęgania H-fosfonianów.

Cel badania: Synteza poszczególnych izomerów 2-wodoro-2-okso-4-metylo-1,3,2-dioksafosforinanu oraz określenie stereochemii katalizowanej związkami miedzi reakcji syntezy hypofosforanów na drodze sprzęgania P-diastereomerycznie czystych *H*-fosfonianów.

Opis realizowanych prac: Zsyntezowano 2-wodoro-2-okso-4-metylo-1,3,2-dioksafosforinan w postaci mieszaniny izomerów *cis/trans*, które następnie rozdzielono na drodze krystalizacji. Izomery poddano reakcji syntezy hypofosforanów katalizowanej związkami miedzi.

Opis najważniejszych osiągnięć: Przeprowadzone analizy wskazują, że niezależnie od użytego substratu (izomeru *cis* lub *trans*) tworzy się zawsze ten sam produkt hypofosforanowy, który prawdopodobnie jest najbardziej trwały termodynamicznie.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Temat wymaga przeprowadzenia dalszych badań, jednak główna wykonawczyni (dr Katarzyna Kulik) przebywa na urlopie macierzyńskim.

6.2. Określenie konfiguracji na atomie fosforu w dinukleozydo-(P3'-N5')amidotiofosforanach (w których mostkowy atom tlenu w pozycji 5' pierścienia 2'-deoksyrybozy został zastąpiony grupą NH) i sprawdzenie podatności na hydrolizę wiązania (P3'→N5') (określenie aktywności fosforamidazowej białka Hint-1). – Ze względu na długotrwały okres niezdolności do pracy głównego wykonawcy (dr Ewa Radzikowska) realizacja zadania została wstrzymana.

6.3. Produkty reakcji oligonukleotydów GNA z utleniającym kompleksem Mn-TMPyP/KHSO₅ oraz wpływ uszkodzeń na trwałość dupleksów GNA/GNA.

Cel badania: Sprawdzenie, czy pod wpływem działania kompleksu Mn-TMPyP/KHSO₅ (kompleks utleniający) nastąpi uszkodzenie cząsteczki GNA oraz zbadanie powstałych produktów utlenienia. Uszkodzenie guaniny może wpłynąć na spadek trwałość dupleksów GNA/GNA. Poznanie produktów uszkodzonego GNA oraz jego właściwości może pozwolić na poznanie jak będzie zachowywać się cząsteczka glikolowego kwasu nukleinowego podczas procesów redox w elektronice.

Opis realizowanych prac: Przeprowadzono próby syntezy monomerów GNA zawierających guaninę według procedur opisanych w literaturze (Synthesis 2006, No. 4, pp 645-653).

Opis najważniejszych osiągnięć: Dotychczas wszystkie próby syntezy monomerów GNA zawierających guaninę zakończyły się niepowodzeniem, a ze względu na długotrwały okres niezdolności do pracy głównej wykonawczyni (od lipca 2015) projekt został zawieszony.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: brak

6.4. Synteza i charakterystyka biochemiczna P-diastereomerycznie czystych form dinukleozydo-(N3'→P5')-amidotiofosforanów.

Cel badania: Synteza P-diastereomerycznie czystych form dinukleozydo-(N3'→P5')-amidotiofosforanów, określenie konfiguracji absolutnej na atomach fosforu i zbadanie właściwości substratowych wobec fosforoamidazy Hint-1.

Opis realizowanych prac: Zsyntezowano 5'-O-DMT-3'-N-(2-tiono-4,4-dimetylo-1,3,2-oksatiafosfolanowe) pochodne 3'-deoksy-3'-aminotymidyny i 3'-deoksy-3'-aminodeoksyguanozyny, które następnie rozdzielono na poszczególne P-diastereomery za pomocą chromatografii kolumnowej. Otrzymane związki poddano reakcji kondensacji z 3'-O-blokowanymi tymidyną, 2'-deoksy adenozyną lub 2'-deoksyguanozyną, w wyniku czego uzyskano dinukleozydo-(N3'→P5')-amidotiofosforany (w postaci czystych P-diastereoizomerów). Metodą RP-HPLC przeprowadzono pomiary szybkości reakcji katalizowanej przez Hint-1 dla serii różnych substratów obejmującej (zarówno w serii „fast” jak i „slow”) T_{NPS}dG, T_{NPS}dA, dG_{NPS}G, T_{NPS}T i dG_{NPS}T. W kolejnym etapie próbki obydwu P-diastereomerycznie czystych T_{NPS}T alkilowano na atomie siarki za pomocą jodku metylu i poddano analizie konfiguracyjnej.

Opis najważniejszych osiągnięć: Wykazano, że T_{NPS}dG, T_{NPS}dA, dG_{NPS}dG, T_{NPS}T i dG_{NPS}T ulegają hydrolizie katalizowanej przez fosforoamidazę Hint-1, a ponadto substraty serii „fast” są trawione z większą szybkością niż substraty serii „slow”. Przeprowadzone analizy NMR (ROESY, COSY, TOCSY) oraz wykonane modelowanie molekularne pozwoliły na określenie absolutnej konfiguracji na atomie fosforu w ditymidylo-(N3'→P5')-amidotiofosforanach.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja: R. Kaczmarek, S. Kaźmierski, T. Pawlak, E. Radzikowska, J. Baraniak, *Assignment of the absolute configuration at stereogenic phosphorus atoms in P-diastereomers of dithymidyl-(N3' → P5')-phosphoramidothioate*. Tetrahedron 2015, DOI:10.1016/j.tet.2015.12.041

7. Analogi nukleotydów jako inhibitory enzymów

7.1. Charakterystyka właściwości enzymatycznych białek Hint1 i Fhit wobec nowych substratów.

Cel badania: Poznanie nowych właściwości białek Hint1 i Fhit. Badania te umożliwią lepsze zrozumienie wymagań substratowych/inhibitorowych badanych enzymów, co może mieć wpływ na planowanie potencjalnych proleków i leków.

Opis realizowanych prac: Kontynuowano badania dotyczące aktywności białek Fhit i Hint1 wobec dinukleotydów zawierających internukleotydowe wiązanie fosforanowe lub tiofosforanowe oraz fosforylowanych bądź niefosforylowanych na 5'-końcu – przebadano nowe związki: ApT, dApdA, TpsA-R_P, TpsA-S_P. Metodą RP-HPLC wyznaczone zostały stałe szybkości reakcji [nmol/min/μg białka] katalizowanej za pomocą białka Fhit wobec nowych substratów - tiofosforanowych analogów A_{PS-PO-PS}A (3 czyste diastereoizomery), G_{PS-PO-PS}G (2 frakcje) R_{PS-PO-PS}R (R - rybawiryna, 3 czyste diastereoizomery). Poszczególne diastereoizomery związku A_{PS-PO-PS}A i R_{PS-PO-PS}R oraz frakcje związków G_{PS-PO-PS}G poddano trawieniu fosfodiesterazą z jadu węża (svPDE) (enzym R_P-specyficzny) w celu określenia konfiguracji względnej/absolutnej atomu fosforu w grupach tiofosforanowych badanych związków.

Opis najważniejszych osiągnięć: Na podstawie porównania stałych szybkości reakcji stwierdzono, że obydwa enzymy preferują dimery fosforylowane na 5'-końcu. Ponadto, stwierdzono, że lepszym substratem są diastereoizomery dimerów tiofosforanowych o konfiguracji R_P na stereogenicznym atomie fosforu. Na podstawie wyników trawień za pomocą nukleazy svPDE wyznaczono konfigurację względną atomu fosforu w grupach tiofosforanowych poszczególnych izomerów. Wyselekcjonowano diastereoizomery będące preferowanymi substratami dla białka Fhit.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja w przygotowaniu.

7.2. Synteza analogów (p)ppGpp.

Cel badania: Synteza analogów (p)ppGpp, modyfikowanych w obrębie grup pirofosforanowych takim ugrupowaniem jak hypofosforan, lub zawierających funkcję tiofosforanową

Opis realizowanych prac: Zsyntezowane w 2014 roku 3'- i 5'-bis-oksatiafosforanowe pochodne guanozyny poddano kolejnym procesom fosforylacji za pomocą anionu pirofosforanowego i hypofosforanowego.

Opis najważniejszych osiągnięć: Podjęte próby nie dały zadowalających wyników, gdyż nie doprowadziły one do otrzymania zamierzonych produktów tetra- i penta- fosforanowych. W wyniku przeprowadzonych syntez otrzymano jedynie związek cykliczny 3',5'-α,γ-ditiotrifosforan guanozyny.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wyniki, na tym etapie badań, nie mają wartości publikacyjnej.

8. Oddziaływania analogów nukleotydów i oligonukleotydów z DNA, RNA, wybranymi białkami i syntetycznymi polimerami.

8.1. Charakterystyka właściwości biologicznych i fizykochemicznych nowych modyfikowanych cząsteczek siRNA zawierających wiązania ditiofosforanowe (badania w ramach współpracy dr X. Yangiem z AM Biotech, Houston, Teksas).

Cel badania: Kontynuacja badań związanych z charakterystyką właściwości biologicznych (wyciszanie ekspresji genów, cytotoksyczność) i fizykochemicznych (właściwości termodynamiczne, badania spektroskopowe) nowych modyfikowanych cząsteczek siRNA zawierających wiązania ditiofosforanowe.

Opis realizowanych prac: W ramach tego zadania ukończono rozpoczęte pod koniec 2014 r. badania CD kompleksu aptameru RNA z modyfikacją PS2 z alfa-trombiną oraz samej alfa-trombiny.

Opis najważniejszych osiągnięć: Badania CD kompleksu alfa-trombiny z aptamerem wykazały zmiany konformacyjne aptameru po związaniu się z białkiem, nie zaobserwowano zmian konformacyjnych białka.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Do redakcji wysłano manuskrypt publikacji: N. Dinuka Abeydeera, Martin Egli, Nehemiah Cox, Karen Mercier, Nascimento Conde, Pradeep S. Pallan, Daniella M. Mizurini, Malgorzata Sierant, Fatima-Ezzahra Hibti, Tom Hassell, Tianzhi Wang, Fengwu Liu, Hongmin Liu, Carlos Martinez, Anil K. Sood, Chiraz Frydman, Robson Monteiro, Richard Gomer,

Barbara Nawrot, Xianbin Yang. *Evoking picomolar binding in RNA by a single phosphorodithioate linkage*.

8.2. Identyfikacja aptamerów o zwiększonym powinowactwie do beta-konglutyny.

Cel badania Synteza, zbadanie właściwości fizykochemicznych analogów aptamerów i ich powinowactwa do białka docelowego (beta-konglutyny z łubinu).

Opis realizowanych prac: Zsyntetyzowano serię moniofosforanów deoksyrybonukleozydów - analogów wyselekcjonowanego wcześniej aptameru (Nadal P et al. Anal Bioanal Chem, 2013). Przeprowadzono próby krystalizacji aptameru niemodyfikowanego. Uzyskano kryształy odpowiednie do badań strukturalnych. Pomiary dyfrakcyjne będą przeprowadzone na początku roku 2016.

Opis najważniejszych osiągnięć: Przeprowadzono syntezę chemiczną zaplanowanych aptamerów (niemodyfikowanego i serii mono-tio-fosforanowych analogów). Opracowano warunki krystalizacji aptameru. Uzyskano kryształ stosowny do pomiarów dyfrakcyjnych.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Po rozwiązaniu struktury samego aptameru i otrzymaniu białka rekombinowanego (beta-konglutyny) podjęta zostanie próba uzyskania kryształu kompleksu aptameru i białka. Ponadto, przeprowadzone zostaną badania powinowactwa aptameru i PS-analogów do białka metodą MST. Prace będą kontynuowane.

8.3. Uzyskanie białka o właściwościach alergenu (beta-konglutyny) z łubinu.

Cel badania: Izolacja genu kodującego beta-konglutynę z genomowego DNA, klonowanie i nadekspresja genu w bakteryjnym systemie ekspresyjnym.

Opis realizowanych prac: Zaprojektowano dwie pary starterów specyficznych do genu beta-konglutyny do izolacji genu z całkowitego RNA (*Lupinus albus* beta-conglutin precursor mRNA, GenBank: AY500372.1). W zależności od sekwencji starterów wyizolowany gen beta-konglutyny wklonowano do plazmidu ekspresyjnego pET28c, tak aby fragment kodujący tzw. metkę histydynową był obecny na początku lub na końcu genu. Wyizolowano całkowity komórkowy RNA z suchych nasion łubinu białego. Przeprowadzono reakcję RT PCR (zastosowano różne temperatury hybrydyzacji starterów w reakcji PCR).

Opis najważniejszych osiągnięć: W przeprowadzonych reakcjach RT-PCR nie uzyskano produktu o odpowiedniej długości odpowiadającej genowi beta-konglutyny (1602 pz). Uzyskany produkt był krótszy (~800 pz). Wynik ten wymaga dalszego wyjaśnienia a badania będą kontynuowane w 2016 r.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Po uzyskaniu białko zostanie wykorzystane do mapowania analogów aptameru do celu identyfikacji najbardziej efektywnych aptamerów i określenia ich powinowactwa do białka docelowego.

8.4. Badania oddziaływań białka Ago2 i jego domen z chemicznie modyfikowanymi kwasami nukleinowymi.

Cel badania: Izolacja i klonowanie fragmentów genu ludzkiego białka Ago2, kodujących poszczególne domeny białka (N-, PAZ, MID oraz PIWI). Nadekspresja w bakteryjnym systemie ekspresyjnym.

Opis realizowanych prac: W ramach tego zadania zaprojektowano startery reakcji PCR specyficzne do fragmentów kodujących poszczególne domeny strukturalne ludzkiego genu Ago2, (N-, PAZ, MID i PIWI). Przeprowadzono reakcje PCR z odpowiednimi parami starterów na matrycy genu Ago2, kodowanego w plazmidzie, wyizolowano produkty reakcji, przeprowadzono klonowanie w plazmidzie ekspresyjnym pET28c oraz wstępne próby nadekspresji w bakterii ekspresyjnych BL21 Star(DE3).

Opis najważniejszych osiągnięć: W wyniku reakcji PCR uzyskano produkty o właściwej długości odpowiadające fragmentom genu Ago2: 260, 354 i 405 pz, kodującym odpowiednio domeny: N-, PAZ i MID) i wklonowano je do plazmidu ekspresyjnego. Obecnie trwają prace nad optymalizacją metody nadekspresji poszczególnych białek. Badania oddziaływań białka Ago2 i jego domen z chemicznie modyfikowanymi kwasami nukleinowymi będą kontynuowane po uzyskaniu substratów białkowych.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Planowanym efektem tych badań jest uzyskanie wiedzy na temat oddziaływań białka Ago2 z chemicznie modyfikowanymi kwasami nukleinowymi (np. chemicznie modyfikowanymi siRNA). Wyniki badań zostaną opublikowane w czasopiśmie o obiegu światowym.

8.5. Badania uszkodzeń oksydacyjnych w nukleozydach tRNA.

Cel badania: Uzyskanie wiedzy na temat uszkodzeń oksydacyjnych jednostek rybonukleotydowych, w szczególności guanozyny i 2-tiourydy, zawartych we fragmentach antykodonu tRNA.

Opis realizowanych prac: Projekt jest kontynuacją rozpoczętych w 2013 roku badań nad uszkodzeniami oksydacyjnymi RNA, i jest realizowany w ramach współpracy polsko-francuskiej z zespołem Dr Genevieve Pratviel, LCC, Tuluza. W roku sprawozdawczym zakończono opracowanie wyników badań nad uszkodzeniami guanozyny zlokalizowanej w pętli antykodonu tRNA, na podstawie badań odpowiednich 17-merów RNA, tzw. ASL, wyników uzyskanych w roku 2014.

Opis najważniejszych osiągnięć: Wyniki opublikowano w pracy: A.Tomaszewska-Antczak, P. Guga, B. Nawrot, G. Pratviel: *Guanosine in a Single Stranded Region of Anticodon Stem-Loop tRNA Models*

is Prone to Oxidatively Generated Damage Resulting in Dehydroguanidinohydantoin and Spiroiminodihydantoin Lesions. Chem. Eur. J. 2015, 21, 6381-6385 (IF 5.696) Q1.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Planowanym efektem tych badań było poszerzenie wiedzy na temat uszkodzeń tRNA w stresie oksydacyjnym, co może zostać wykorzystane do przygotowania kolejnego projektu badawczego.

8.6. Nadekspresja białka selU z bakterii *E. coli*.

Cel badania: W ramach badań statutowych przeprowadzono wstępne eksperymenty mające na celu izolację i klonowanie w plazmidzie pUC19 genu *selU* z bakterii *E. coli*.

Opis realizowanych prac: Gen kodujący białko selenourydno tRNA syntazę (SelU) wyizolowano jako produkt reakcji RT PCR na matrycy całkowitego RNA z bakterii *E. coli*. Produkt reakcji (1100 pz) poddano hydrolizie enzymami restrykcyjnymi NcoI i HindIII a następnie wklonowano do plazmidu pUC19. Poprawność sekwencji wstawki *selU* potwierdzono w reakcji sekwencjonowania.

Opis najważniejszych osiągnięć: Wyniki uzyskane w badaniach wstępnych były kontynuowane w ramach realizacji grantu "Biosynteza seleno-modyfikowanych nukleozydów w pętli antykodonu transferowych kwasów rybonukleinowych. Ewaluacja enzymatycznej transformacji 2-tiourydyny do 2- selenourydyny, badania funkcji i struktury selenourydno syntazy tRNA z *E. coli*." Stały się również podstawą pracy magisterskiej studenta PŁ Michała Różańskiego.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Planowanym efektem tych badań jest uzyskanie narzędzi enzymatycznych do badań transformacji 2-tiourydyny do 2- selenourydyny w bakteriach *E. coli*. Wyniki badań zostaną opublikowane w czasopiśmie o obiegu światowym.

8.7. Białka wiążące 5'-monotiofosforany nukleozydów.

Cel badania: identyfikacja białek wiążących 5'-monotiofosforany nukleozydów z zastosowaniem metody fotozszywania

Opis realizowanych prac: Do badań użyto tiofosforanowego mononukleotydu z dołączonym fotoczułym nukleozydem (8-bromo-urydyną). Jego kompleks z białkiem Fhit poddano fotozszywaniu działając promieniowaniem UV 312nm. Produkt trawiono trypsyną i powstałe fragmenty peptydowe analizowano za pomocą LC-MS.

Opis najważniejszych osiągnięć: Zidentyfikowano fragment peptydowy, z którym tiofosforan nukleozydu był związany kowalencyjnie (w wyniku fotozszywania). Stwierdzono, że fragment ten należy do części N-końcowej białka, która z powodu znacznej swobody konformacyjnej nie jest określana metodą rentgenografii strukturalnej.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja w redagowaniu.

9. Analogi nukleozydów, nukleotydów i oligonukleotydów w biologii syntetycznej i komórkowej.

9.1. Polifosforany - potencjalne modulatory procesów metabolicznych (badania prowadzone we współpracy z Prof. Karolem Bruzikiem, University of Illinois, Chicago).

Cel badania: Uzyskanie modelowych polifosforanów do badań fizykochemicznych i biologicznych.

Opis realizowanych prac: W roku sprawozdawczym kontynuowano badania nad charakterystyką fizyko-chemiczną i biologiczną analogów polifosforanów - potencjalnych modulatorów procesów metabolicznych. Badania zostały przeprowadzone przez partnera amerykańskiego, współpracującego z CBMiM PAN w tym temacie. Wytworzone z CBMiM oligomery odblokowano i usunięto ze złoza stałego, przeprowadzono charakterystykę fizyko-chemiczną otrzymanych analogów polifosforanów.

Opis najważniejszych osiągnięć: Uzyskane modele polifosforanów zostaną wykorzystane do badań biologicznych. Badania te będą kontynuowane w roku 2016.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Planowanym efektem tych badań jest pogłębienie wiedzy na temat funkcji polifosforanów w komórce. Wyniki będą opublikowane w literaturze o obiegu światowym.

9.2. Badanie regulacji ekspresji genów w modelowym układzie wyciszania białka zielonej fluorescencji GFP (Green Fluorescence Protein) za pomocą monomerów i trimerów RNA.

Cel badania: Określenie zdolności ustrukturalizowanych nanocząsteczek zbudowanych z RNA do regulacji (wyciszania) ekspresji genów.

Opis realizowanych prac: W oparciu o narzędzia bioinformatyczne opracowano metodologię poszukiwania, wyboru i analizy strukturalnych fragmentów RNA (motywów RNA) spełniających kryterium podatności na działanie specyficznych enzymów nukleolitycznych.

Opis najważniejszych osiągnięć: Wykonano szereg analiz bioinformatycznych pozwalających na otrzymanie motywu trójramiennego (ang. 3-way junction) o zdefiniowanej strukturze. Następnie zaprojektowano cząsteczki RNA zawierające ten motyw, a jednocześnie posiadające fragment

regulatorowy, który będzie wykorzystany do wyciszenia ekspresji reporterowego białka zielonej fluorescencji.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki podsumowano w publikacji: Dominika Jedrzejczyk and Arkadiusz Chworos, *Structural identification of the novel 3 way-junction motif*, DNA and RNA Nanotechnology 2015, DOI 10.1515/rnan-2015-0004

9.3. Wykorzystanie związków typu skoniugowanych oligoelektrolitów do barwienia egzosomalnych pęcherzyków komórkowych.

Cel badania: Określenie zdolności wnikania i wybarwienia pęcherzyków egzosomalnych za pomocą sond fluorescencyjnych zsyntezowanych na bazie styrylostilbenu.

Opis realizowanych prac: Przygotowano roztwory styrylostilbenowych pochodnych skoniugowanych oligoelektrolitów do barwienia komórek ssaczy i egzosomów pochodzących z tych komórek.

Opis najważniejszych osiągnięć: Badania za pomocą mikroskopii fluorescencyjnej i cytometrii przepływowej (FACS) wskazują, iż skoniugowane oligoelektrolity zawierające trzon styrylostilbenowy efektywnie wybarwiają pęcherzyki egzosomalne pochodzące z komórek ludzkich. Pokazuje to uniwersalność stosowanych tutaj znaczników fluorescencyjnych, gdyż uprzednio wykazano, iż wybarwiają one efektywnie struktury błoniaste całych komórek eukariotycznych (drożdże, komórki ssacze).

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki podsumowano w publikacji: Liliana Czernek, Arkadiusz Chworos, Markus Duechler, *The uptake of extracellular vesicles is affected by the differentiation status of myeloid cells*, Scand. J. Immunol., 2015, 82(6), 506-14.

9.4. Synteza i charakterystyka latarni molekularnych modyfikowanych resztą 2-tiouracylu działających w oparciu o zjawisko FRET. Charakterystyka latarni molekularnych modyfikowanych S2dU wystawionych na działanie czynnika utleniającego.

Cel badania: Weryfikacja użyteczności zaprojektowanych cząsteczek *molecular beacons* jako narzędzia diagnostycznego do wykrywania rodników hydroksylowych.

Opis realizowanych prac: Zostały przeprowadzone pomiary emisji promieniowania próbek (*molecular beacons* z S2dU) wystawionych na działanie różnych stężeń czynnika utleniającego (H₂O₂) oraz badania zdolności asocjacyjnej komplementarnych oligonukleotydów do *molecular beacons* poprzez analizę elektroforetyczną w żelu poliakryloamidowym (PAGE) samych *molecular beacons* oraz po dodaniu oligonukleotydów o sekwencji komplementarnej, a w tym zbadanie powinowactwa *molecular beacons* zawierających H2dU do oligonukleotydu komplementarnego z jednostką dA lub dG poprzez wykonanie analizy PAGE.

Opis najważniejszych osiągnięć: Do najważniejszych uzyskanych wyników należy zaliczyć wykonanie pomiarów emisji promieniowania próbek (*molecular beacons* z S2dU) wystawionych na działanie różnych stężeń czynnika utleniającego (H₂O₂), które potwierdzają hipotezę badawczą, że zachodząca w obecności rodnika hydroksylowego desulfuracja S2dU do H2dU, powoduje dysocjację dupleksu DNA stanowiącego trzon *latarni molekularnej*, z powodu znaczącego obniżenia się stabilności termodynamicznej takiego dupleksu. Uzyskane wyniki potwierdzają użyteczność tak zaprojektowanych cząsteczek jako narzędzia diagnostycznego do wykrywania rodników stresu oksydacyjnego.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki zostały zaprezentowane w postaci komunikatu konferencyjnego (plakatu) pt. "*Molecular beacons modified with 2-thiouracyl as a tool for in vitro detection of reactive oxygen species*"; Anna Chwiałkowska, Milena Sobczak, Elżbieta Sochacka, Barbara Nawrot, X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, OSCO X, 16-18 kwietnia 2015, Łódź, oraz w formie wykładu pt. "Niezwykłe latarnie życia"; Anna Chwiałkowska, Panel Wiedzy, 21 lipca 2015, Łódź.

10. Analiza krystalograficzna katalitycznych kwasów nukleinowych oraz niskocząsteczkowych ligandów – analogów nukleotydów.

10.1. Określenie warunków krystalizacji wybranych analogów nukleotydów, ich kompleksów z białkami wiążącymi nukleotydy (np. HINT1) i przeprowadzenie badań strukturalnych dla uzyskanych kryształów.

Cel badania: Celem zadania jest poznanie struktury przestrzennej badanych związków z grupy analogów Ap₄A w kompleksach z białkami, co pozwoli na analizę sposobu wiązania analogów nukleotydów do białek typu HINT1.

Opis realizowanych prac: W roku sprawozdawczym kontynuowano próby ko-krystalizacji białka hHINT1 z szeregiem związków z grupy analogów Ap₄A. Dla kryształów wszystkich potencjalnych kompleksów białko-ligand, otrzymanych w temperaturze pokojowej i 8 C, przeprowadzono pomiary dyfrakcyjne na synchrotronie DESY/PETRA III w Hamburgu podczas sesji pomiarowej w czerwcu

2015 roku. Zadanie badawcze obejmowało również korekty publikowanej struktury kompleksu hHINT1/JB419 w ramach odpowiedzi na uwagi recenzentów.

Opis najważniejszych osiągnięć: Zaobserwowano wzrost kryształów potencjalnych kompleksów HINT1/analogi $A_{p4}A$ odmiennych morfologicznie od kryształów białka krystalizowanego w formie apo, co mogło sugerować udział liganda w powstających strukturach krystalicznych, jednakże w żadnym z dziesięciu zarejestrowanych zbiorów danych nie stwierdzono obecności liganda związanego z białkiem. Skorygowane dane dotyczące struktury kompleksu hHINT1/JB419. Ponowna analiza danych potwierdziła z dużym prawdopodobieństwem, że białko hHINT1 może preferencyjnie wiązać jeden z diastereoizomerów związku JB419 o konfiguracji $S_P S_P$, z mieszaniny diastereomerów która została użyta do kokrystalizacji. Zarejestrowano dane dla króliczego homologu białka HINT1 w jednoskośnej grupie przestrzennej $C2$ (parametry komórki $a=125.00$, $b=62.68$, $c=75.34$, $\alpha=90.00$, $\beta=114.35$, $\gamma=90.00$), jednak z czterema cząsteczkami białka w kompleksie z AMP. Taki układ nie został dotychczas opisany w literaturze i nie jest obecny w bazie PDB.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Dane strukturalne kompleksu hHINT1/JB419 zostały zdeponowane w bazie PDB (kod 4ZKL) oraz opisane w publikacji wysłanej do *Int. J. Biol. Macromol.*: Dolot R.M., Kaczmarek R., Sęda A., Krakowiak A., Baraniak J., Nawrot B. Crystallographic studies of the complex of human HINT1 protein with a non-hydrolyzable analog of $A_{p4}A$ (w odpowiedzi na recenzje). Dane strukturalne białka rHINT1 wykrytowanego w grupie przestrzennej $C2$ zostaną wykorzystane do przygotowania publikacji.

10.2. Określenie przydatności komercyjnie dostępnych preparatów fosfodiesterazy z jadu węża (enzymu hydrolizującego w sposób stereoselektywny tiofosforanowe wiązanie internukleotydydowe) pod kątem możliwości przeprowadzenia krystalizacji tego białka oraz określenie wstępnych warunków krystalizacji.

Cel badania: Celem jest poznanie struktury przestrzennej i określenie wymagań strukturalnych fosfodiesterazy dla wiązania potencjalnych substratów nukleotydydowych zawierających wiązania tiofosforanowe łączące silnie zmodyfikowane analogi nukleozydów.

Opis realizowanych prac: W roku sprawozdawczym kontynuowano pracę nad preparatem fosfodiesterazy I izolowanej z jadu węża grzechotnika *C. adamanteus* (Abnova), który po próbie usunięcia zanieczyszczeń i zatężeniu na koncentratorach wirówkowych (50 kDa) wykorzystano do prób krystalizacji w warunkach screenu Hampton Research INDEX.

Opis najważniejszych osiągnięć: Próby krystalizacji pozwoliły na uzyskanie kryształów, które zostaną przetestowane podczas najbliższej sesji pomiarowej na synchrotronie BESSY (Berlin), w styczniu 2016 roku.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymanie wyników (uzyskanie kryształu i rozwiązanie struktury) pozwoli na opublikowanie w domenie publicznej.

10.3. Opracowanie warunków izolacji naturalnego drożdżowego białka HINT1 z hodowli *S. cerevisiae*.

Cel badania: Celem zadania było sprawdzenie możliwości wyodrębnienia natywnego białka HINT1 z drożdży (bez nadekspresji).

Opis realizowanych prac: Przeprowadzono szereg hodowli drożdżowych w różnych warunkach. Drożdże rozdrażniano za pomocą szklanych kulek. Próby wyizolowania białka z frakcji białkowej drożdży za pomocą agarozowego złoża powinowactwa z immobilizowanym nukleotydem AMP jak dotychczas nie przyniosły pozytywnych wyników (nie wyizolowano żadnego białka, które wykazywałoby powinowactwo do złoża agaroz-AMP).

Opis najważniejszych osiągnięć: Opracowano hodowlę drożdży *S. cerevisiae* i destrukcję ich ściany komórkowej. Nie udało się wyizolować drożdżowego białka HINT1.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Uzyskane wyniki wskazują, że prawdopodobnie stężenie białka HINT1 w drożdżach jest tak niskie, że niemożliwa jest izolacja tego białka w ilości pozwalającej na podjęcie prób krystalizacji.

10.4. Badania strukturalne kompleksów ludzkiej α -trombiny z 15-nukleotydydowym aptamerem DNA posiadającymi modyfikacje w obszarze zasad heterocyklicznych (współpraca dr. R. Dolota z dr. Xianbin Yangiem).

Cel badania: Celem zadania jest poznanie struktury przestrzennej kompleksów α -trombiny z aptamerami DNA modyfikowanymi w obrębie zasad heterocyklicznych oraz wpływu wprowadzonych modyfikacji wybranych nukleotydydów aptameru na sposób wiązania do cząsteczki białka docelowego.

Opis realizowanych prac: W roku sprawozdawczym przeprowadzono próby krystalizacji i optymalizację wstępnych warunków dla kompleksów α -trombiny z modyfikowanymi aptamerami tego białka. Dla zoptymalizowanych kryształów jednego kompleksu przeprowadzono pomiary dyfrakcyjne na synchrotronie DESY/PETRA III w Hamburgu podczas sesji pomiarowej w czerwcu 2015 roku.

W toku są prace nad optymalizacją warunków krystalizacji kompleksu trombiny z drugim aptamerem, oraz z dodatkowym aptamerem zawierającym dalsze modyfikacje chemiczne.

Opis najważniejszych osiągnięć: Określono zoptymalizowane warunki krystalizacji kompleksu α -trombina z aptamerem pierwszym, dla którego zarejestrowano dane dyfrakcyjne z wysoką rozdzielczością (1.69 Å). Uzyskane informacje strukturalne pokazały istotny wpływ wprowadzonej modyfikacji na sposób wiązania się liganda, polegający na zwiększeniu ilości wiązań wodorowych między łańcuchami aptameru i białka, co stanowi wytłumaczenie obserwowanego podwyższenia wartości stałej wiązania tego aptameru w stosunku do aptameru bez modyfikacji.

Dla kompleksu α -trombina/aptamer drugi uzyskano wstępne warunki krystalizacji, jednak otrzymane kryształy były słabej jakości i nie udało się dla nich zarejestrować danych dyfrakcyjnych, wobec czego prace nad optymalizacją warunków krystalizacji są nadal prowadzone.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Dane strukturalne uzyskanego kompleksu oraz pozostałych zostaną zdeponowane w bazie PDB, jak również wejdą w skład przygotowywanej publikacji.

10.5. Krystalizacja protaminy z łososia (*Oncorhynchus keta*).

Cel badania: Celem zadania jest określenie warunków krystalizacji siarczanu protaminy z łososia, ze względu na brak doniesień literaturowych oraz danych strukturalnych tego białka w bazie PDB.

Opis realizowanych prac: W roku sprawozdawczym przeprowadzono próby krystalizacyjne siarczanu protaminy w warunkach screenów Jena Biosciences Basic 1-4 oraz Hampton Research Index 1-4.

Opis najważniejszych osiągnięć: Zaobserwowano wzrost kryształów w ośmiu próbkach z testowanych 192 warunków.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane kryształy zostaną wykorzystane do przeprowadzenia pomiarów dyfrakcyjnych. Określone warunki krystalizacji zostaną wykorzystane do jej optymalizacji.

10.6. Badania strukturalne kompleksu lizozym - aptamer DNA.

Cel badania: Celem zadania jest określenie trójwymiarowej struktury kompleksu lizozymu z wyselekcjonowanym aptamerem DNA o sekwencji pozwalającej na wiązanie się do tego białka.

Opis realizowanych prac: W roku sprawozdawczym przeprowadzono próby krystalizacji lizozymu z białka jaja kurzego z aptamerem DNA o sekwencji opisywanej w literaturze (Kawde *et al.*, 2005, Potty *et al.*, 2011) z wykorzystaniem screenów Hampton Research NATRIX 1-2 oraz Jena Bioscience Nuc-Pro 1-4 (w sumie 192 zestawy warunków). Dla otrzymanych kryształów przeprowadzono pomiary dyfrakcyjne na liniach eksperymentalnych synchrotronu DESY/PETRA III (Hamburg).

Opis najważniejszych osiągnięć: Dla wstępnie uzyskanych kryształów przeprowadzono pomiary dyfrakcyjne, jednak rozwiązane struktury pochodzące z pięciu zestawów danych pokazują jedynie obecność białka w strukturze kryształów, bez związanej cząsteczki aptameru. Do chwili obecnej zarejestrowano wzrost kryształów w ponad 30 z ustawionych wariantów. Prace nad uzyskaniem ww. kompleksu będą kontynuowane.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Dotychczas otrzymane wyniki nie mają samodzielnej wartości publikacyjnej.

10.7. Optymalizacja warunków krystalizacji białka TC1 (Trp-cage protein (badania prowadzone przez dr. R. Dolota we współpracy z dr Agatą Jeziorną).

Cel badania: Celem zadania jest optymalizacja warunków krystalizacji białka TC1 (otrzymanego od dr Agaty Jeziornej) w celu uzyskania materiału w postaci krystalicznej, który zostanie wykorzystany do eksperymentów NMR.

Opis realizowanych prac: Zoptymalizowano warunki krystalizacji białka TC1. Dla uzyskanych kryształów przeprowadzono pomiary dyfrakcyjne w celu określenia grupy przestrzennej kryształów, parametrów i składu komórki elementarnej, w porównaniu z wcześniej publikowanymi danymi. Rozpoczęto pracę nad przekrystalizowaniem całej ilości przekazanego materiału.

Opis najważniejszych osiągnięć: Zoptymalizowane warunki krystalizacji białka TC1 różnią się nieco od tych, zawartych w literaturze, jednak pozwalają na szybki wzrost dobrze wykształconych, regularnych kryształów. Bazując na zarejestrowanych danych dyfrakcyjnych o rozdzielczości 1.42 Å potwierdzono, że białko TC1 krystalizuje w grupie przestrzennej C2, o parametrach komórki $a=56.93$, $b=47.31$, $c=34.94$, $\alpha=90.00$, $\beta=118.54$, $\gamma=90.00$, z sześcioma cząsteczkami białka w części niezależnej, co jest zgodne z danymi dostępnymi w literaturze. Otrzymane kryształy zostały przekazane do badań NMR.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Dotychczas otrzymane wyniki nie mają samodzielnej wartości publikacyjnej, jednak zostaną uwzględnione w przygotowywanej publikacji.

10.8. Ocena przydatności preparatu lizozymu $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ do krystalizacji (badania prowadzone przez Dr R. Dolota we współpracy z dr Agatą Jeziorną).

Cel badania: Celem zadania była próba krystalizacji lizozymu znakowanego ^{13}C ^{15}N , z przeznaczeniem do dalszych eksperymentów NMR.

Opis realizowanych prac: W roku sprawozdawczym przeprowadzono próbę krystalizacji lizozymu znakowanego $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ w warunkach zbliżonych do warunków krystalizacji lizozymu natywnego. Wykonano analizę porównawczą lizozymu znakowanego $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ i natywnego z wykorzystaniem elektroforezy żelowej i pomiaru dichroizmu kołowego.

Opis najważniejszych osiągnięć: Nie zaobserwowano wzrostu kryształów lizozymu znakowanego $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ w warunkach analogicznych do krystalizacji lizozymu natywnego. Ponieważ lizozym znakowany został wytworzony na drodze nadekspresji rekombinowanego białka w układzie bakteryjnym (*E. coli*), zaistniało podejrzenie, że otrzymane białko może posiadać inne sfałdowanie, na skutek braku tworzenia mostków disiarczkowych stabilizujących strukturę lizozymu. Hipotezę potwierdzono poprzez porównanie wyników pomiarów dichroizmu kołowego dla białka znakowanego i natywnego. Analiza elektroforetyczna potwierdziła, że białko znakowane nie uległo degradacji i w eksperymentach używano lizozymu pełnej długości.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Dotychczas otrzymane wyniki nie mają samodzielnej wartości publikacyjnej. Wiedza na temat nieprawidłowego sfałdowania białka zostanie wykorzystana do zaprojektowania i przeprowadzenia eksperymentu refoldingu, a prawidłowo zwinięte białko zostanie scharakteryzowane i wykorzystane do dalszych eksperymentów.

11. Komórkowe modele do określania aktywności przeciwnowotworowej związków niskocząsteczkowych.

11.1. Komórkowe modele do określania aktywności przeciwnowotworowej związków niskocząsteczkowych – badania przesiewowe.

Cel badania: Celem badania była identyfikacja nowych związków niskocząsteczkowych o właściwościach cytotoksycznych.

Opis realizowanych prac: określono cytotoksyczność 37 niskocząsteczkowych związków chemicznych za pomocą testu MTT wobec ludzkich komórek nowotworowych HeLa, K562, MOLT-4, CFPAC. Dla związków o wysokiej toksyczności wyznaczono parametr IC_{50} i względną aktywność kaspazy 3 i 7 (markerów apoptozy) w komórkach. Sprawdzono czy badane związki mogą oddziaływać z DNA.

Opis najważniejszych osiągnięć: Zidentyfikowano 13 związków toksycznych dla komórek nowotworowych. Wykazano, że toksyczność 4 z tych związków wynika z indukcji apoptozy. W przypadku 1 związku wykazano ochronne właściwości wobec plazmidowego DNA trawionego enzymem endonukleolitycznym, co sugeruje oddziaływanie tego związku z DNA.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Identyfikacja związków o potencjalnych właściwościach terapeutycznych (przeciwnowotworowych). Uzyskane wyniki przedstawiono w następujących publikacjach i zgłoszeniach patentowych:

1. M. Krawiecka, B. Kuran, J. Kossakowski, M. Cieślak, J. Kazmierczak-Barańska, K. Królewska, B. Nawrot: Synthesis and Cytotoxic Properties of Halogen and Aryl-/Heteroarylpiperazinyl Derivatives of Benzofurans. *Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry* 2015, 15, 115-121
2. E. Lodyga-Chruscinska, M. Symonowicz, A. Sykula, A. Bujacz, E. Garribba, M. Rowinska-Zyrek, S. Oldziej, E. Klewicka, M. Janicka, K. Krolewska, M. Cieslak, K. Brodowska, L. Chruscinski: Chelating ability and biological activity of hesperetin Schiff base. *J. Inorg. Biochem.* 2015, 143, 34–47
3. M. Napiórkowska, M. Cieślak, J. Kaźmierczak-Barańska, K. Królewska, A. Czapla, B. Kuran: Synthesis and preliminary studies of biological activity of amino derivatives of 4-azatricyclo-[5.2.1.0_{2,6}]dec-8-ene-3,5-dione with silicon in the structure. *Heterocyclic Commun.* 2015, 21, 19–24
4. R. Żurawiński, M. Mikołajczyk, M. Cieślak, K. Królewska, J. Kaźmierczak-Barańska: Synthesis and in Vitro Cytotoxicity of Cross-Conjugated Prostaglandin A and J Series and Their Hydroxy Derivatives. *Org. Biomol. Chem.* 2015, 13, 7000-7012

Zgłoszenia patentowe:

1. Zastosowanie medyczne soli tryfenylofosfoniowych, zgłoszenie krajowe P.413297,28/07/2015; Piotr Bałczewski, Joanna Skalik, Barbara Nawrot, Marcin Cieślak, Julia Kaźmierczak-Barańska
2. Medical use of triphenylphosphonium salts, Zgłoszenie do Europejskiego Biura Patentowego nr EP15460043.1, 13.08.2015; Piotr Bałczewski, Joanna Skalik, Barbara Nawrot, Marcin Cieślak, Julia Kaźmierczak-Barańska.

11.2. Kontynuacja badań nad rolą białek z rodziny striatyn w biologii komórki.

Cel badania: Zbadanie wpływu obniżenia ekspresji striatyn na poziom ekspresji kinazy cdk2, białka zaangażowanego w regulację cyklu komórkowego.

Opis realizowanych prac: Do jednoczesnego obniżenia ekspresji białek z rodziny striatyn (striatyna, SG2NA, zinedyna) wykorzystano dupleksy siRNA specyficzne dla mRNA wybranych białek. siRNA wprowadzano do komórek HEK293T za pomocą transfekcji w obecności lipofektaminy. Stężenie każdego dupleksu wynosiło 60nM (łącznie 180nM). 48h po transfekcji sprawdzono poziom cdk2 metodą Western-blottingu wykorzystując królicze przeciwciała poliklonalne (Sigma). Jako kontrolę zastosowano komórki HEK293T transfekowane kontrolnym siRNA w stężeniu 100 nM. Nie stwierdzono wpływu jednoczesnego obniżenia ekspresji striatyny, SG2NA i zinedyny na ekspresję kinazy zależnej od cdk2 w komórkach HEK293T. Podobny efekt (czyli brak wpływu na ekspresję cdk2) zaobserwowano w komórkach HEK293T z obniżonym poziomem samej striatyny. Prawdopodobnie striatyna, SG2NA i zinedyna nie uczestniczą w regulacji ekspresji cdk2-zależnej kinazy w komórkach HEK293T.

Opis najważniejszych osiągnięć: Zidentyfikowano aktywne cząsteczki siRNA dla 3 różnych białek z rodziny striatyn. Nie stwierdzono wpływu jednoczesnego wyciszenia tych białek na ekspresję kinazy cdk2 w komórkach HEK293T. Prawdopodobnie striatyna, SG2NA i zinedyna nie uczestniczą w regulacji ekspresji kinazy cdk2 w komórkach HEK293T.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Uzyskane wyniki pogłębiają wiedzę na temat funkcji białek z rodziny striatyn na biologię komórki.

11.3. Toksyczność β -glukanu izolowanego z owsa wobec różnych typów ludzkich komórek nowotworowych i komórek prawidłowych (współpraca CBMiM PAN i firmy Beta Bio Technology, Częstochowa).

Cel badania: Celem zadania jest uzyskanie danych na temat toksyczności β -glukanu wobec wybranych linii ludzkich komórek nowotworowych i komórek prawidłowych.

Opis realizowanych prac: Za pomocą metody MTT określono cytotoksyczność β -glukanu wobec ludzkich komórek nowotworowych oraz prawidłowych w czasie 48 h. Jako związek referencyjny zastosowano doksorubicynę, lek przeciwnowotworowy. Badania przeprowadzono na komórkach raka płuc (A549), raka szyjki macicy (HeLa), przewlekłej białaczki szpikowej (K562), raka trzustki (CFPAC), raka prostaty (PC3), raka jelita grubego (HCT116), neuroblastomy (U87MG), raka piersi (MDA-MB-231) oraz na prawidłowych komórkach śródbłonka (HUVEC).

Opis najważniejszych osiągnięć: badania wykonano na zlecenie firmy biotechnologicznej Beta Bio Technology sp. z o. o. Na podstawie umowy z Beta Bio Technology sp. z o. o. wyniki badań będą opublikowane w domenie publicznej po uzyskaniu ochrony patentowej.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: na podstawie uzyskanych wyników i we współpracy z firmą Beta Bio przygotowano zgłoszenie patentowe. Poszerzenie wiedzy na temat możliwych efektów biologicznych wywołanych przez β -glukan, który jest dostępny komercyjnie jako suplement diety.

11.4. Ocena immunostymulujących właściwości β -glukanu za pomocą metody RT-PCR w czasie rzeczywistym (*real time RT-PCR*) (współpraca CBMiM PAN i firmy Beta Bio Technology, Częstochowa).

Cel badania: Określenie względnego poziomu ekspresji mRNA dla *IL-1 β* , *IL-3*, *IL-6*, *IL-12p40*, *TNF- α* oraz genu referencyjnego - *GAPDH* w komórkach mysich monocytów RAW 264.7 inkubowanych z β -glukanem lub lipopolisacharydem (związek referencyjny) w porównaniu do komórek niestymulowanych.

Opis realizowanych prac: Do badań użyto monocyty-makrofagi mysiej białaczki (RAW 264.7), do których dodawano β -glukan. Jako kontrolę pozytywną użyto lipopolisacharyd (LPS). LPS (fragment bakteryjnej ściany komórkowej) jest silnym induktorem ekspresji cytokin w komórkach układu immunologicznego. Kontrolę negatywną stanowiły komórki niestymulowane ani β -glukanem ani LPS. Poziom ekspresji poszczególnych cytokin w komórkach niestymulowanych przyjęto arbitralnie jako równy jedności. Aby wyeliminować możliwy wpływ LPS na aktywację komórek inkubowanych z β -glukanem (LPS może zanieczyszczać preparat β -glukanu) komórki preinkubowano z polimiksyną B.

Opis najważniejszych osiągnięć: badania wykonano na zlecenie firmy biotechnologicznej Beta Bio Technology sp. z o. o. Na podstawie umowy z Beta Bio Technology sp. z o. o. do czasu uzyskania ochrony patentowej wyniki badań nie mogą być opublikowane.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: na podstawie uzyskanych wyników i we współpracy z firmą Beta Bio przygotowano zgłoszenie patentowe. Poszerzenie wiedzy na temat możliwych efektów biologicznych wywołanych przez β -glukan, który jest dostępny komercyjnie jako suplement diety.

12. Exosomy jako przenośniki informacji pomiędzy komórkami.

12.1. Do apoptotic cancer cells send dormancy signals to the cells in their neighborhood?

Cel badania: We want to investigate whether apoptotic cancer cells send a 'protective' message through exosomes which will cause recipient cells to stop proliferation and acquire a more resistant phenotype.

Opis realizowanych prac: Apoptosis of a melanoma cell line was induced by UV irradiation. Exosomes produced by apoptotic cells were isolated from the cell culture supernatants. The purified exosomes were then added to a fresh cell cultures (the same cell lines as the one from which exosomes were isolated) and the possible inhibition of proliferation was measured by MTT test. Exosomes isolated from undisturbed cultures served as negative controls.

Opis najważniejszych osiągnięć: In the presence of exosomes derived from apoptotic (UV-treated) cells, proliferation was not significantly diminished in comparison to cells grown in the presence of exosomes from healthy cells.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: The obtained results are not suitable for publishing. More sensitive methods such as clonogenic assays could be considered to find support for the research hypothesis.

13. Wpływ S-glutationowania białek na interakcje z ligandami.

Cel badania: Przetestowanie systemów do wykrywania S-glutationowanej formy domeny rdzeniowej białka p53, DBDp53 (DBDp53= fragment peptydowy obejmujący aminokwasy 94-293 w natywnym p53).

Opis zrealizowanych prac: 1) Synteza chemiczna i oczyszczanie HPLC sekwencji P21 i referencyjnej MUT z rodaminą na 3' końcu. Wyznakowane rodaminą sekwencje pozwolą na wykonanie badań metodą FRET efektu zszywania srebrem dupleksów DNA, bowiem odpowiednie sekwencje P21 i MUT wyznakowane fluoresceiną po 5'stronie drugiej nici również zostały już przygotowane. 2) Otrzymane z Instytutu Weizmanna białko DBDp53 zostało zmodyfikowane w warunkach 30 mM glutationu utlenionego i oczyszczone techniką HPLC. 3) Zarówno białko DBDp53 jak i zmodyfikowane glutationem na trzech resztach cysteiny DBDp53 zostały zmodyfikowane fluorescencyjnie. 4) Wyznakowanie fluorescencyjne DBDp53 i S-glutationowanego DBDp53 wykonane podczas warsztatów z MST, które odbyły się w ZCHB w sierpniu 2015r., posłużyły do badania oddziaływań białko-białko metodą MST.

Opis najważniejszych osiągnięć: Metodą MST otrzymano wyniki świadczące o dimeryzacji domeny DBDp53 w oddziaływaniu z taką samą, wyznakowaną fluorescencyjnie domeną DBDp53 i braku dimeryzacji modyfikowanej glutationem domeny DBDp53 z wyznakowaną fluorescencyjnie domeną DBDp53 w warunkach fizjologicznego stężenia soli, tj. 150 mM NaCl w PBS.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: 1) Wytworzenie narzędzi do badania radiooporności komórek nowotworowych. 2) Na podstawie wcześniejszych badań, wykonanych w ramach realizacji grantu własnego, zaobserwowano, że tylko najbardziej zgodna z sekwencją kanoniczną, sekwencja promotorowa białka p21 w oddziaływaniu z S-glutationowaną na resztach trzech cystein domeną p53 oddziałuje ze zmodyfikowanym białkiem. ($EC_{50} \sim 6.4 \mu M$ otrzymane metodą MST w warunkach 10 mM buforu fosforanowego pH 7,4, 213 mM NaCl, 25 mM imidazol, 5 mM DTT). Otrzymane wyniki stanowią przesłankę do wyjaśnienia mechanizmu oddziaływania dupleksów DNA P21 i GADD45M z białkami DBDp53 i S-glutationowaną formą DBDp53.

Sprawozdanie z działalności naukowej Samodzielnej Pracowni Modelowania Komputerowego

14. Teoretyczne badania mechanizmu katalitycznego podstawienia nukleofilowego przy krzemie.

Cel badania: Celem badań jest dokładne zrozumienie mechanizmów katalizy podstawienia nukleofilowego przy krzemie na poziomie molekularnym.

Opis realizowanych prac: W ramach badań podjęto próby interpretacji roli jonów w kondensacji grup silanolowych w reakcjach syntezy silseskwioksanów. Za pomocą obliczeń teoretycznych DFT scharakteryzowano drogi reakcji prowadzących do enkapsulacji jonów (Li^+ , Na^+ , F^- , Cl^- , H^+ i H^-) wewnątrz klatek silseskwioksanowych o różnych rozmiarach (T_4 - T_{12}). Obliczono energie enkapsulacji i energie deformacji klatki. Wykazano, że jedynie jony H^+ i H^- mogą przenikać przez ścianę klatki bez znaczącej bariery energii. Enkapsulacja pozostałych jonów wiąże się z odwracalnym rozerwaniem klatki (zerwaniem wiązania siloksanowego z udziałem cząsteczki wody i ponowną kondensacją powstałych grup silanolowych). Energia oddziaływania jonów z klatką silseskwioksanową zależy od wielkości zarówno jonu jak i klatki i jest wypadkową korzystnych oddziaływań elektrostatycznych i niekorzystnych oddziaływań sterycznych.

Opis najważniejszych osiągnięć: Wykazano że jedynie jony H^+ i H^- mogą przenikać przez ścianę klatki bez znaczącej bariery energii. Enkapsulacja pozostałych jonów wiąże się z odwracalnym rozerwaniem klatki (zerwaniem wiązania siloksanowego).

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki prezentowano na 3 konferencjach. Jedna publikacja jest w druku (2016), druga w przygotowaniu.

15. Modelowanie złożonych układów homo- i kopolimeryzacyjnych.

Cel badania: Zbadanie kinetyki i mechanizmów różnych procesów polimeryzacyjnych metodami modelowania numerycznego ich przebiegu.

Opis realizowanych prac: W 2015 roku skończono badanie azeotropowej kopolimeryzacji odwracalnej. Zbadano teoretycznie na drodze modelowania komputerowego Monte Carlo oraz metodą całkowania numerycznego równań różniczkowych całą gamę procesów kopolimeryzacji odwracalnej wykazujących cechy kopolimeryzacji azeotropowej. Opracowano nowy model reakcji wymiany segmentalnej w polimeryzacji L-Laktydu katalizowanej oktaniem cyny(II).

Opis najważniejszych osiągnięć: Wykazano, że azeotropowość kopolimeryzacji odwracalnej zachodzi tylko gdy spełnione są określone relacje między stałymi szybkości propagacji i depropagacji. Wykazano bardzo wysokie (ok. 100-krotne) podwyższenie reaktywności wiązania estrowego najbliższego atomowi cyny względem pozostałych wiązań w łańcuchu.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki badań opublikowane (R. Szymański, Azeotropic equilibrium copolymerization, *Macromol. Theory Simul.* 24, 413-418 (2015)). Badania te pomogły w sformułowaniu projektu badawczego, sfinalizowanego uzyskaniem Grantu NCN, nr umowy: UMO-2014/15/B/ST5/05321, „Hybrydowa metoda modelowania i optymalizacji procesów polimeryzacji”. Wyniki badań polimeryzacji L-Laktydu opublikowano: S. Sosnowski, P. Lewinski, L-Lactide polymerization catalysed by tin(II) 2-ethyl-hexanoate. A deeper look at chain transfer reactions, *Polym. Chem.*, 6, 6292-6296 (2015).

16. Modelowanie procesów homo- i kopolimeryzacji zachodzących w bardzo małych objętościach (skala nano).

Cel badania: Zbadanie wpływu małej objętości (skala nano) na przebieg procesów polimeryzacyjnych.

Opis realizowanych prac: Badania teoretyczne oraz modelowanie komputerowe procesów polimeryzacyjnych przebiegających w małych objętościach (np. w nano-kroplach) powodujących, że tylko ograniczona liczba (kilka) łańcuchów w nich się tworzy. Przebieg a więc i opis takich procesów jest dyskretny, stochastyczny. Analiza dotychczasowych wyników wskazuje, że prowadzenie procesów polimeryzacyjnych w układach zdyspergowanych do nano-kropli może być korzystne z punktu widzenia rozkładu mas molowych.

Opis najważniejszych osiągnięć: W roku 2015 opracowano algorytmy modelowania procesów chemicznych przebiegających w układach zdyspergowanych. Wyniki modelowania najprostszej reakcji modelowej: odwracalnej asocjacji $A+B=C$, zostały przygotowane do opublikowania: wykazały one, że wielkość nano-kropli wpływa zarówno na kinetykę i termodynamikę tego procesu. Wstępne wyniki modelowania żyjącej polimeryzacji nieodwracalnej w nano-kroplach wskazują na wyraźne zwężenie rozkładu mas molowych produktu.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Praca dotycząca asocjacji $A+B=C$ przygotowana do wysłania do czasopisma *J. Chem. Phys.*

Sprawozdanie z działalności naukowej Zakładu Chemii Polimerów

17. Liniowe i szczepione kopolimery otrzymywane z pochodnych kwasów fosforu.

Cel badania: Zbadanie kinetyki polikondensacji, diglicerolu i poliglicerolu z kwasem fosforowym w układzie niekatalizowanym i w obecności katalizatorów.

Opis realizowanych prac: Badano kinetykę polikondensacji kwasu fosforowego (KF) z diglicerolem (DiGly) i poliglicerolem (PGL) w układach niekatalizowanych i w obecności katalizatorów. Jako katalizatory zastosowano diizopropylaminę, imidazol, kwas nadrenowy oraz układ katalityczny diizopropylamina/kwas nadrenowy.

DiGly i PGL stosowane w pracy pochodziły z firmy Solvay. Skład i strukturę tych reagentów ustalono na podstawie analizy widm $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ NMR i spektrogramów masowych FAB.

Reakcje prowadzono w masie, w układzie próżniowym, w 110 °C. Początkowe stosunki stężeń reagentów KF/DiGly (PGL) wynosiły 1:2, 1:1 oraz 2:1 (mol/mol). W reakcjach katalizowanych do układu reakcyjnego dodawano 1% molowy (w stosunku do KF) katalizatora. Postęp reakcji monitorowano metodą $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR pobierając próbki mieszaniny reakcyjnej w dowolnie wybranych odstępach czasu. Na podstawie analizy widm $^{31}\text{P}\{^1\text{H}\}$ NMR rejestrowanych w D_2O przy $\text{pH} \approx 12$ określono przyrost udziału tworzących się w reakcji mono-, di- i triestrów oraz zmniejszanie się udziału kwasu fosforowego, w funkcji czasu. Na podstawie uzyskanych danych kinetycznych obliczono obserwowane stałe szybkości przemiany k^{app} (zużywania KF) we wszystkich przeprowadzonych doświadczeniach. Ustalono, że w reakcjach katalizowanych wartości stałych szybkości są około dwukrotnie większe niż w reakcjach prowadzonych bez użycia katalizatora. Rodzaj katalizatora (spośród zastosowanych w badaniach) nie wpływa na zmianę szybkości procesu.

Opis najważniejszych osiągnięć: Dobór katalizatorów w polikondensacji KF z DiGly i PGL, oszacowanie wartości obserwowanych stałych szybkości przemiany k^{app} w układach katalizowanych i niekatalizowanych.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja przygotowana do wysłania:

Julia Pretula, Krzysztof Kaluzynski, Stanisław Penczek

"Polycondensation of Diglycerol and Polyglycerol with H_3PO_4 . Reversibly Degradable Gel from Biobased Products".

18. Kontrolowana (ko)polimeryzacja cyklicznych estrów alifatycznych: mechanizmy i zastosowania w syntezie polimerów o założonej strukturze.

Cel badania: Kontynuacja badań polimeryzacji laktydu (LA) w obecności silnych zasad organicznych oraz synteza (ko)polimerów LA o założonej strukturze.

Opis realizowanych prac: Przeprowadzono polimeryzację LA wobec 2-(9H-puryno-6-yl-amino)-etanolu (polimeryzacja w masie, 120 °C) oraz 3-[(4,5-dihydro-1H-imidazolo-2-yl)amino]-propanolem (polimeryzacja w masie 120 °C, THF – temp. pokojowa oraz 80 °C, benzen 80 °C) podczas których pobierano próbki poddane później analizie ^1H NMR, MALDI-TOF oraz GPC. Część wyników doświadczeń potwierdzono po przeprowadzeniu eksperymentów online przy zastosowaniu spektroskopii FTIR.

Przeprowadzono polimeryzację LA katalizowaną/inicjowaną układem katalityczno-inicjującym oktanian cyny (II) ($\text{Sn}(\text{Oct})_2$) alkohol benzyłowy w THF w 80 °C.

Zsyntezowano poliestrole: poli(L-laktyd) i poli(D-laktyd) zakończone grupami izopropylową i hydroksylową oraz grupami 2-ureido-4[1H]-pirymidynową (UPy, poli(węglan trimetyleny) zakończony grupą izopropylową i hydroksylową. Przekształcono hydroksylowe grupy końcowe PLA dioli i PTMC diolu w diizocyjanianowe w reakcji z diizocyjanianem heksametyleny (HDI) oraz diizocyjanianem izoforonu (IPDI) wobec laurynianu dibutylocyny (DBTL) jako katalizatora. Zsyntezowano kopolimery typu ABA i BAB zawierające grupy izopropylowe lub 2-ureido-4[1H]-pirymidynowe na drodze reakcji grup końcowych prepolimerów, prowadzonej w obecności laurynianu dibutylocyny jako katalizatora. Wszystkie reakcje przebiegały z praktycznie ilościową wydajnością. Otrzymano liniowe stereokompleksy z kopolimerów zawierających enancjomeryczne bloki poli (L-laktydu) i poli(D-laktydu) przygotowując równomolowe mieszaniny w dioksanie i N-metylo-pirolidynie. Zbadano morfologie i właściwości termiczne kopolimerów odpowiednio metodami SEM oraz DSC i TGA.

Opis najważniejszych osiągnięć:

Ustalono, że w zależności od zastosowanego katalizatora polimeryzacja może być inicjowana zarówno grupami $-\text{OH}$ jak i $>\text{NH}$. Zbadano przebiegi kinetyczne i ustalono, że polimeryzacja ma charakter kontrolowany i żyjący. Analiza próbek, które przez długi czas były trzymane w warunkach polimeryzacji po osiągnięciu pełnej konwersji pozwoliła zidentyfikować produkty procesów ubocznych. W polimeryzacji katalizowanej $\text{Sn}(\text{Oct})_2$ potwierdzono możliwość wyjaśnienia intensywnej wymiany segmentalnej przy nieznacznym zwiększeniu rozrzutu mas molowych na początku polimeryzacji jako

efektu większej, w porównaniu z kolejnymi merami, reaktywności pierwszego meru - znajdującego się przy centrum aktywnym.

Wprowadzenie grup zdolnych do tworzenia wielokrotnych wiązań wodorowych (2-ureido-4[1H]-pirymidynowych (UPy) oraz wytworzenie stereokompleksów syntetyzowanych kopolimerów (oddziaływanie enancjomerycznych segmentów poli(L,L-laktydu) i poli(D,D-laktydu)) pozwoliło uzyskać polepszone właściwości fizykochemiczne (np. podwyższona temperatura topnienia) w porównaniu do kopolimerów zakończonych nieoddziaływującymi grupami.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Część wyników została opublikowana w pracacy P. Lewinski, S. Sosnowski, S. Kazmierski, S. Penczek, *L-Lactide polymerization studied by 1H NMR with diffusion-ordered spectroscopy (DOSY): a "One NMR Tube Experiment" providing data on monomer conversion, polymer structure, M_n and M_w* , Polym. Chem., **6**, 4353–4357 (2015).

19. Reaktywne polimery cyklicznych estrów i cyklicznych eterów.

Cel badania: W ramach trwającej od szeregu lat współpracy pomiędzy Zakładem Chemii Polimerów CBMM w Łodzi a Grupą Polimerów kierowaną przez prof. Filipa Du Prez w Uniwersytecie w Gandawie, w roku 2015 kontynuowano realizację Projektu badawczego obejmującego lata 2014-2015 dotyczącego otrzymywania biodegradowalnych sieci polimerowych (poliestrowych) z zastosowaniem metod polimeryzacji kationowej cyklicznych estrów oraz reakcji typu „click”. Celem przygotowania odpowiednich materiałów koniecznych do realizacji współpracy, w CBMM opracowano wcześniej metody otrzymywania polimerów ϵ -kapolaktonu zawierających wiązania nienasycone umożliwiające ich sieciowanie.

Opis realizowanych prac: Przeprowadzono szereg kationowych kopolimeryzacji ϵ -kapolaktonu z cyklicznymi eterami zawierającymi grupy nienasycone (eter glicydyloowo-hexadienowy i eter glicydyloowo-oleinowy). Wykorzystując otrzymane polimery CL (PCL) zawierające na końcach łańcucha poliestrowego po kilka wiązań nienasyconych, próbowano otrzymać sieci poliestrowe wykorzystując w tym celu otrzymany z laboratorium w Belgii związek sieciujący bis-triazolino-dion (bisTAD). Napotkano jednak pewne trudności w kontrolowaniu procesu sieciowania związane m.in. z rozpuszczalnością prepolimerów i z samorzutnym sieciowaniem. Alternatywnie opracowano syntezę funkcjonalnych polimerów ϵ -kapolaktonu (PCL) zakończonych obustronnie grupami oleinowymi. Najpierw otrzymano makromonomer PCL zakończony z jednej strony fragmentem oleinowym inicjując polimeryzację kapolaktonu kwasem oleinowym (oktanian cyny jako katalizator) a następnie przeprowadzono sprzężanie monofunkcyjnego PCL z zastosowaniem diizocyjanianu. Otrzymane funkcjonalne PCL charakteryzowano z zastosowaniem metod ^1H NMR, GPC, MALDI TOF.

Opis najważniejszych osiągnięć: Makromonomery PCL o różnych ciężarach cząsteczkowych wykorzystano zarówno w CBMM jak i podczas pobytów w laboratorium w Gandawie do otrzymywania sieci polimerowych z zastosowaniem bisTADów jako związków sieciujących. Otrzymane sieci poddano wszechstronnej analizie oznaczając udział frakcji rozpuszczalnej, wykonując badania DSC, TGA, SEM, testy mechaniczne oraz badania odporności hydrolitycznej.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Uzyskane wyniki po opracowaniu, a także ich dyskusja przedstawiająca zależności od zastosowanych warunków sieciowania zostaną zawarte w przygotowywanej publikacji.

Sprawozdanie z działalności naukowej Zakładu Inżynierii Materiałów Polimerowych

20. Wytwarzanie i charakterystyka ultra cienkich warstw krzemoorganicznych z fazy gazowej z alkoksylanów w zdalnej plazmie wodorowej.

Cel badania: Celem realizacji zadania jest zbadanie właściwości warstw wytwarzanych z nowych, niestosowanych do tej pory prekursorów alkoksylanowych i porównanie ich z otrzymywanymi wcześniej warstwami z prekursorów siloksanowych.

Opis realizowanych prac: Badano mechanizmy reakcji prowadzące do wytworzenia pierwszych trwałych produktów powstających przy udziale zdalnej plazmy wodorowej metodami NMR, chromatografii, spektrometrii mas oraz FTIR.

Opis najważniejszych osiągnięć: Metodą plazmy wodorowej, otrzymano i zanalizowano uwodornione krzemotlenowęglowe warstwy CVD z dimetoksymetylosilanu (DMMS). Analizę warstw przeprowadzono metodą DSC, spektroskopii FTIR, UV-Vis, fluorescencji oraz elipsometrii spektroskopowej. Zależności temperaturowe procesu depozycji wskazują na ich amorficzny i gradientowy charakter o strukturze krzeminki.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wyniki stanowią wstępny etap planowanych badań nad wytwarzaniem aktywnych cienkowarstwowych organiczno-nieorganicznych struktur hybrydowych. Publikacja opracowanych wyników.

21. Badania syntezy i właściwości fizykochemicznych nowych materiałów krzemoorganicznych zawierających struktury silseskwioxanowe.

Cel badania i opis realizowanych prac:

Otrzymanie i zbadanie właściwości polimerowych materiałów hybrydowych zbudowanych z jednostek silseskwioxanowych.

Opis realizowanych prac: W trakcie realizacji zadania kontynuowano badania dotyczące syntezy liniowych poli(silseskwioxanów) z podstawnikami fluoroforowymi na drodze modyfikacji odpowiednich prekursorów (reakcja Heck'a, addycja tiol-enowa). Badano również wpływ warunków reakcji na wydajność otrzymywania oktaedrycznego silseskwioxanu klatkowego (POSS) z podstawnikami 3-merkaptopropylowymi.

Opis najważniejszych osiągnięć: Wykazano zależność właściwości optycznych poli(silseskwioxanów) o właściwościach fluorescencyjnych od regularności łańcucha polimerowego oraz struktury i oraz elastyczności łącznika alkilowego między łańcuchem siloksanowym a cząsteczką pirenu. Otrzymane wyniki wskazują, że są to bardzo istotne czynniki, które mogą determinować efektywność sensoryczną. Potwierdzono również możliwość wykorzystania tych materiałów do detekcji i analizy ilościowej kationów metali (Cu^{2+} i Fe^{3+}).

W części badań dotyczącej POSS z grupami 3-merkaptopropylowymi stwierdzono znaczne zwiększenie wydajności produktu w reakcjach prowadzonych w mieszaninie rozpuszczalników polarnych i niepolarnych. Zaproponowano również nową wydajną metodę oczyszczania tego związku oraz wykazano, że krystaliczny okta(3-merkaptopropyl)POSS wykazuje unikalne właściwości fizykochemiczne w czasie ogrzewania i chłodzenia (przejście: plastyczny kryształ – faza krystaliczna I – faza krystaliczna II).

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wstępne wyniki badań dotyczących fluorescencyjnych poli(silseskwioxanów) są podstawą projektu grantowego pt „Nowe polimerowe materiały hybrydowe jako sensory obecności jonów metali” zgłoszonego przez mgr Marię Nowacką w konkursie Preludium NCN (15.12.2015). Badania uzyskane w części badań dotyczącej POSS z grupami 3-merkaptopropylowymi są podstawą publikacji „Octakis(3-mercaptopropyl)octasilsesquioxane - a reactive nanocube of unique self-assembled packing morphology” (A. Kowalewska; M. Nowacka; W. Maniukiewicz) zgłoszonej do Journal of Organometallic Chemistry (2015).

22. Lokalne właściwości fizykochemiczne warstwy powierzchniowej mikrosfer polimerowych o budowie rdzeń-powłoka, o hydrofobowym rdzeniu i o hydrofilowej warstwie powierzchniowej.

Cel badania: Celem badań było poznanie struktury warstwy powierzchniowej mikrosfer o budowie jądro-powłoka zawierających w powłoce segmenty polistyrenu i poliglicydołu. W celu realizacji zadania wykorzystano związki modelowe zsyntetyzowane kopolimery polistyren-poliglicydol o kontrolowanej długości łańcuchów. Planowano zbadanie ich właściwości w roztworach, w szczególności zdolność do tworzenia nanocząstek polimerowych, ich stabilność koloidalną oraz zdolność do pęcznienia

w zależności od stężeń i temperatury. Ponadto, zamierzano określić parametry reologiczne warstwy powierzchniowej cząstek w różnej temperaturze i wilgotności środowiska, stosując w tym celu mikroskopię sił atomowych.

Opis realizowanych prac: Opracowano metodę syntezy kopolimerów di-blokowych zawierających blok polistyrenu i blok liniowego poliglicydolu. Kopolimery zsyntetyzowano metodą polimeryzacji anionowej. W pierwszym etapie uzyskano oligomery polistyrenu o kontrolowanej długości łańcucha, zakończone grupami hydroksylowymi. W drugim etapie, na końcowych grupach alkoholowych polistyrenu, napolimeryzowano glicydol, zawierający zablokowane grupy hydroksylowe grupami etyloetoksyloowymi. Po procesie polimeryzacji grupy etyloetoksyloowe poddano hydrolizie, uzyskując grupy metylohydroksylowe w każdej jednostce powtarzalnej segmentu poliglicydolu. Kopolimery scharakteryzowano na podstawie widm ^1H NMR na każdym etapie syntezy kopolimeru, oznaczono masy molowe za pomocą chromatografii żelowej. Zbadano rozpuszczalność kopolimerów w wodzie i wodzie zawierającej frakcję dioksanu lub metanolu.

Opis najważniejszych osiągnięć: Zsyntetyzowano i scharakteryzowano grupę kopolimerów polistyren-poliglicydol, o stałej długości łańcucha polistyrenu $M_n=3000$ i zmiennej masie molowej poliglicydolu w zakresie $M_n=1000-10000$

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Na podstawie uzyskanych wyników przygotowano część materiału, który stanowi część publikacji.

23. Nowe funkcjonalizowane silseskwioxany.

Cel badania: Celem planowanych badań było otrzymanie silseskwioxanów a ugrupowaniami funkcyjnymi umożliwiającymi tworzenie nowych układów kompozytowych.

Opis realizowanych prac: Realizowano badania dotyczące silseskwioxanów zawierających przyłączone do klatki silseskwioxanowej cząsteczki zawierające ugrupowania hydroksylowe i aminowe. Otrzymane, modyfikowane silseskwioxany wykorzystano do inicjowania polimeryzacji laktydu.

Opis najważniejszych osiągnięć: Uzyskano silseskwioxany z przyłączonymi segmentami poliestrowymi, scharakteryzowano ich budowę, porównując ją z zaplanowaną.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Otrzymane wyniki stanowią element pracy przygotowywanej do druku.

24. Otrzymywanie funkcyjnych materiałów krzemooorganicznych.

Cel badania: Celem badań było otrzymanie mikrosfer polisiloksanowych o wąskim rozrzucie wielkości średnic. Metoda polega na zastosowaniu polimeryzacji strąceniowej cyklicznych monomerów siloksanowych wobec środka sieciującego, którym jest dwu bądź wielocykliczny oligosiloksan. Opracowano biobójcze mikrosfery polisiloksanowych o szerokim spektrum działania na bakterie i grzyby.

Opis realizowanych prac: Mikrosfery polisiloksanowe o wąskim rozrzucie średnic zamierzamy otrzymać na drodze polimeryzacji dyspersyjnej cyklicznych monomerów siloksanowych wobec środka sieciującego, którym jest dwu bądź wielocykliczny oligosiloksan. W roku sprawozdawczym przeprowadzono badania dotyczące syntezy wspomnianego wyżej związku sieciującego. Przeprowadzono badania dotyczące syntezy polisiloksanowych mikrosfer mikroporowatych prowadzonej na drodze kształtowania i konsolidowania cząstek w emulsji wodnej z użyciem 1,3-diwinylotetrametylodisiloksan, który był hydrosililowany grupami SiH polimeru wobec katalizatora platynowego. Syntezy prowadzono w warunkach umożliwiających wprowadzanie do mikrosfer jonów metali a następnie ich redukcję do normy niejonowej.

Opis najważniejszych osiągnięć: Środek sieciujący, bis-1,2-(heptametylocyklotetrasiloksan) etan otrzymano w wyniku dimeryzacji octametylocyklotetrasiloksanu w obecności katalizatora rodnikowego (AIBM). Wielocykliczny oligosiloksan otrzymano kopolimeryzując tetrawinylotetrametylocyklotetrasiloksan (V4) z tetrawodorotetrametylocyklotetrasiloksanem (DH4). Katalizatorem reakcji był katalizator platynowy Karstedta [Pt(0)]. Otrzymano mikrosfery polisiloksanowe zawierające w swojej strukturze metaliczne srebro. Badanie mikrobiologiczne mikrosfer są wykonywane przez specjalistów z Akademii Medycznej w Gdańsku.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki badań syntezy związku sieciującego przeznaczonego do badań syntezy mikrosfer polisiloksanowych otrzymywanych na drodze polimeryzacji dyspersyjnej będą wykorzystywane podczas prac kontynuowanych w przyszłym roku sprawozdawczym. W przypadku pozytywnych wyników badań biologicznych prowadzonych w Akademii Medycznej w Gdańsku, będzie przygotowane zgłoszenie patentowe.

Sprawozdanie z działalności naukowej Zakładu Fizyki Polimerów

25. Wytwarzanie i badanie właściwości cienkich warstw wybranych materiałów organicznych o potencjalnych zastosowaniach w optoelektronice.

Cel badania: Celem badań było wytworzenie cienkich warstw materiałów organicznych. Badania przeprowadzono dla polisiloksanów z przyłączoną dyskotyczną mezogeniczną grupą boczną. Materiały polisiloksanowe zostały w zespole prof. W. A. Stańczyka

Opis realizowanych prac: Metodami TOA (analiza termo optyczna) i DSC i zbadano krystalizację podczas nanoszenia cienkich warstw z roztworu i przejścia fazowe pod wpływem zmian temperatury. Wykonano pomiary UV-VIS w celu określenia czystości otrzymanego materiału oraz badania rentgenograficzne (WAXS i SAXS).

Opis najważniejszych osiągnięć: Wykazano, że warstwy polisiloksanu zmodyfikowanego przez wbudowanie w łańcuch główny trifenylenu nie wykazują ruchliwości ładunku wystarczającej do zastosowania w organicznych tranzystorach polowych.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki zostały opublikowane Tomasz Makowski*, Tomasz Ganicz, Wojciech Zajączkowski, Wojciech Pisula, Włodzimierz Andrzej Stańczyk, Adam Tracz "Synthesis and thermotropic behavior of side chain polysiloxane bearing triphenylene moiety" eXPRESS Polymer Letters Vol.9, No.7 (2015) 636–646 IF: 2.953

26. Właściwości fizyczne krystalizujących układów polimerowych - nanokompozyty i polimery krystalizujące.

26.1. Polimery.

Cel badania: Zanalizowanie przebiegu odkształcenia plastycznego i kawitacji w polimerach, w których warunki deformacji ulegają zmianie wskutek znacznego zmniejszenia grubości.

Opis realizowanych prac: Wytworzone zostały folie z poli(4-metyl -1-pentenu) o grubościach 1-0.05 mm. Przeprowadzone zostały badania właściwości mechanicznych podczas jednoosiowego odkształcania. Rejestrowano zmiany kształtu próbek w czasie deformacji, obserwowano występowanie pobielenia zdeformowanych polimerów. W polimerach o różnym stopniu odkształcenia metodami rentgenowskimi określano zmiany strukturalne i występowanie zjawiska nanokawitacji.

Opis najważniejszych osiągnięć: Stwierdzono, że poli(4-metyl-1-penten) intensywnie kawituje na granicy plastyczności zarówno w cienkich jak i grubych foliach i zachodzi w nim reorientacja kawitacji podczas powstawania przewężenia w materiale.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Badania będą kontynuowane w następnym roku i zakończone publikacją.(A.Pawlak, J.Krajenta)

26.2 Nanokompozyty.

Cel badania: Poprawa właściwości mechanicznych PP w nanokompozytach z krzemionką

Opis realizowanych prac: Wykonano badania morfologii, struktury i właściwości mechanicznych oraz procesów deformacji nanokompozytów hybrydowych PP/krzemionka z modyfikowanymi cząstkami krzemionki.

Opis najważniejszych osiągnięć: Stwierdzono poprawę sztywności i udarności w nanokompozytach iPP zawierających krzemionkę modyfikowaną grupami aminowymi oraz kompatybilizator w porównaniu z kompozytami zawierającymi krzemionkę niemodyfikowaną.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki zaprezentowano w postaci publikacji przesłanej do J.Polym.Res. i zaakceptowanej do druku (M. Grala, Z. Bartczak).

27. Zestawianie polimerów w kontakcie z innymi materiałami.

Cel badania: Uzyskanie laminatów wzmocnionych wysoko zorientowanymi taśmami polimerowymi.

Opis realizowanych prac: Do badań wybrano PLA. W skali laboratoryjnej, metodą wyłaczania i deformacji w stanie zestalonym, uzyskano 100 mb wysokowytrzymałej krystalicznej taśmy PLA o szerokości 3 mm i grubości 0.3 mm. Z taśm wykonano plecionki w formie ściśle upakowanej płaskiej siatki. Plecionkę laminowano innym gatunkiem polilaktydu w temperaturze powyżej przejścia szklistego, ale poniżej temperatury topnienia krystalicznych taśm w plecionce.

Opis najważniejszych osiągnięć: Uzyskano termoformalną wysoko-wytrzymałą płytę z dwóch różnych gatunków PLA.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki posłużą do zilustrowania możliwości uzyskiwania wysokowytrzymałych, termoformalnych, biodegradowalnych i lekkich płyt w europejskim wniosku grantowym NMBP-08-2016 *Affordable weight reduction of high-volume vehicles and components taking into account the entire life-cycle.* (J. Morawiec, A. Gałęski)

28. Otrzymywanie sztywnych lekkich i wytrzymałych pianek poprzez spienianie nanokompozytów polimerowych.

Cel badania: Opracowanie sztywnych i lekkich pianek

Opis realizowanych prac: Przeprowadzono badania wpływu warunków spieniania na strukturę komórkową pianek na bazie polipropylenu z nanowłókanami PTFE otrzymanych dwiema różnymi metodami: spienianie na drodze ciągłego wytłaczania (continuous extrusion foaming) oraz spienianie mikrokulek (expanded bead foaming).

Opis najważniejszych osiągnięć: Okazało się, że użycie metody spieniania mikrokulek pozwala uzyskać pianki PP+PTFE o strukturze zamknięto komorowej o kilkakrotnie wyższym współczynniku ekspansji w stosunku do pianek wytworzonych metodą spieniania podczas ciągłego wytłaczania. W dużym stopniu związane jest to z ułatwionym odprowadzaniem ciepła z wnętrza spienianych mikrokulek. Dodatkowo obecność 3 % wag. nanowłókien PTFE w znaczny sposób wpłynęła na zmniejszenie rozmiarów komórek pianek uzyskanych obiema metodami spieniania, zwiększenie gęstości komórek. Okazało się również, że splątana sieć nanowłókien PTFE umożliwia otrzymanie pianek zamknięto komorowych zawierających dodatkowo nanokomórki w żeberkach pianki na bazie PP+PTFE, które w znaczny sposób wpływają na poprawę właściwości mechanicznych pianki. Dodatkowo stwierdzono na podstawie wstępnych badań termicznych DSC obecność mezofazy PP w przypadku spienionych mikrokulek z dużym współczynnikiem ekspansji.

W celu optymalizacji metody ekspansji nanokompozytów polimerowych z nanowłóknami PTFE wysłano wytworzone w CBMiM PAN kompozyty i koncentraty PP z PTFE do Zakładu Materiałów Polimerowych, Uniwersytet Bayreuth, Niemcy.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Publikacja w przygotowaniu. (K. Jurczuk, A. Gałęski)

Sprawozdanie z działalności naukowej Samodzielnej Pracowni Struktury Polimerów

29. Kompozyty i nanokompozyty polimerowe.

Cel badania: Polipropylen izotaktyczny (PP) w rombowej formie gamma, która tworzy się pod wysokim ciśnieniem, charakteryzuje się odmiennymi właściwościami mechanicznymi niż iPP skryształizowany w jednoskośnej formie alfa. Celem badań było określenie wpływu nanonapełniaczy na nieizotermiczną krystalizację nanokompozytów izotaktycznego polipropylenu (PP) z nanonapełniaczami płytkowymi i włóknistymi pod wysokim ciśnieniem.

Opis realizowanych prac: Nanokompozyty PP (Adstif HA740N, Basell), o MFI wynoszącym 5 g/10 min., z zawartością 1-5% wag. zmodyfikowanego organicznie montmorylonitu, o-MMT (Cloisite C15, Southern Clay Products), akrylowanego poli(tetrafluoroetyleny), PTFE, Metablen A 3000 (Mitsubishi Rayon) oraz wielościennych nanorurek węglowych, MWCNT (Nanocyl) wytworzono poprzez mieszanie w stanie stopionym. PP dobrano pod kątem uzyskania dobrej dyspersji napełniaczy

i rozwłóknienia PTFE podczas mieszania. Wykorzystano komercyjny koncentrat Plasticyl 2001 (zawierający 20% wag. MWCNT), a w przypadku materiałów z o-MMT koncentrat z maleinowanym PP (Polybond 3150, Chemtura Corporation) o stosunku wagowym o-MMT/Polybond 1:2. Podczas mieszania dodano do PP środki antyutleniające i stabilizujące. Badania metodą mikroskopii świetlnej oraz skaningowej elektronowej oraz rentgenowskie pokazały, że uzyskano rozwłóknienie PTFE a także rozwarstwienie o-MMT w matrycy PP.

Zbadano nieizotermiczną krystalizację nanokompozytów pod wysokim ciśnieniem, w zakresie do 300 MPa, podczas ochładzania, z szybkością ok. 8 °C/min. Ponadto, zakończono badania nieizotermicznej krystalizacji PP ze środkami zarodkującymi pod wysokim ciśnieniem.

Opis najważniejszych osiągnięć: o-MMT nie wpłynął znacząco na temperatury nieizotermicznej krystalizacji PP pod wysokim ciśnieniem, natomiast MWCNT i PTFE podwyższyły temperatury krystalizacji, maksymalnie o 17 °C, co wskazuje na ich zdolność do zarodkowania krystalizacji PP w tych warunkach. W przypadku nanokompozytów z CNT wzrost temperatury zależał od koncentracji nanonapełniacza.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Ukazała się publikacja, kolejna jest w przygotowaniu. Przedstawiono 3 komunikaty i 1 poster na konferencjach międzynarodowych oraz 2 komunikaty na konferencjach krajowych.

30. Krystalizacja polimerów pod wpływem odkształceń ścinających.

Cel badania: Odkształcenia ścinające w stanie stopionym mogą w znaczny sposób przyspieszyć krystalizację polimerów i spowodować zmiany w ich strukturze nadcząsteczkowej. Celem badań było określenie wpływu odkształceń ścinających na krystalizację biodegradowalnego kopolimeru poli(adypinianu-ko-tereftalanu butylenu) (PBAT), polilaktydu (PLA) oraz nanokompozytu PLA z haloizytem (HNT).

Opis realizowanych prac: W badaniach wykorzystano komercyjny PBAT EcoFlex F Blend C1200, produkcji BASF. Ponadto badano PLA 4032D (NatureWorks) o zawartości D-laktydu 1.15% oraz średniej wagowo masie molowej 126 kg/mol, jak również nanokompozyt tego PLA z 6%wag. HNT (Sigma Aldrich), oraz również nanokompozyt z dodatkiem modyfikatora N,N'-etyleno-bis-stearamidu, EBS (Sigma Aldrich), w stosunku wagowym do HNT 2:8. Nanokompozyty otrzymano mieszając HNT i EBS z PLA w stanie stopionym. Czyste polimery homogenizowano również poprzez mieszanie w stanie stopionym. Stopione polimery poddawano odkształceniu ścinającemu w urządzeniu Linkam CSS-450, chłodzono, analizując krystalizację metodą depolaryzacji światła, a następnie badano próbki *ex-situ* wykorzystując różne metody: rozpraszanie promieni X, skaningową kalorymetrię różnicową, mikroskopię świetlną polaryzacyjną i skaningową elektronową.

PBAT poddawano odkształceniu ścinającemu w temperaturach z zakresu 120-150 °C, z szybkościami 10-100 /s, natomiast PLA i nanokompozyty w 160 °C z szybkością 10 /s, przez 1 i 5 min, a chłodzono natomiast z szybkościami 10 i 30 °C/min.

Opis najważniejszych osiągnięć: Odkształcenie ścinające spowodowało wzrost temperatury krystalizacji PBAT, zwiększający się w miarę obniżania temperatury ścinania, wzrostu szybkości i czasu ścinania, maksymalnie o ok. 10 °C. Ponadto analiza krystalizacji próbek ponownie stopionych i ochładzanych wskazała, że zarodki krystalizacji powstałe wskutek odkształcania ścinającego nie uległy całkowitemu stopieniu. Ścinanie instensyfikowało również krystalizację PLA, zwiększając stopień krystaliczności osiągnięty podczas ochładzania, przy czym obecność HNT nasilała ten efekt. Badania mikroskopowe struktury wskazały na obecność zarodków rzędowych, natomiast analiza rentgenowska nie wykazała orientacji kryształów PLA, co może wskazywać, że krystalizację zarodkowały głównie zarodki punktowe.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki przedstawiono w formie posteru na konferencji krajowej, natomiast publikacja jest w przygotowaniu.

Sprawozdanie z działalności naukowej Samodzielnej Pracowni Badań Strukturalnych

31. Rozwój metodologii badań układów bioorganicznych z wykorzystaniem spektroskopii MRJ i spektrometrii mas

31.1 Charakterystyka linezolidu i jego syntetycznych prekursorów z wykorzystaniem spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego w cieple stałym i spektrometrii mas.

Cel badania: Zastosowanie wysokorozdzielczej spektroskopii NMR w cieple stałym oraz spektrometrii mas jako komplementarnych technik w charakterystyce spektralnej i strukturalnej linezolidu (pierwszego syntetycznego antybiotyku z grupy oksazolidynonów) oraz jego dwóch syntetycznych prekursorów: (R)-N-{3-[3-fluoro-4-(morfolino-4-ylo)fenylo]-2-oksazolidyn-5-ylo}metanolu oraz (R)-N-{3-[3-fluoro-4-(morfolino-4-ylo)fenylo]-2-oksazolidyn-5-ylo}metyloazydku.

Opis realizowanych prac: Badania prowadzone były we współpracy z prof. Jadwigą Frelek i prof. Wojciechem Szczepkiem. Podstawowym narzędziem badawczym wykorzystanym do określenia parametrów strukturalnych dwóch form polimorficznych linezolidu (formy II i III) oraz jego strukturalnych analogów były eksperymenty NMR w cieple stałym, tj. ^{13}C , ^{15}N CP/MAS, $^{19}\text{F}\{1\text{H}\}$ (hpdec) oraz zmiennotemperaturowe widma (VT) ^{13}C CP/MAS. Ścieżki fragmentacji badanych układów opracowano na podstawie standardowych widm mas, widm fragmentacyjnych opartych na technikach łączonego skanowania oraz pomiarów HR-MS interesujących jonów w warunkach jonizacji elektronami.

Opis najważniejszych osiągnięć: Każda z zastosowanych do badań technik spektralnych dostarczyła specyficzny zestaw informacji o badanych układach. Wysokorozdzielcze widma ^{13}C , ^{15}N i ^{19}F w cieple stałym wykazały dynamiczne nieuporządkowanie cząsteczek w sieci krystalicznej dla dwóch form polimorficznych linezolidu (formy II i III). Warto podkreślić, że takie podejście eksperymentalne w badaniach polimorfizmu linezolidu ma charakter nowatorski. Zmiennotemperaturowe pomiary ^{13}C CP/MAS potwierdziły, iż zaobserwowane ruchy molekularne mają charakter lokalny i dotyczą jedynie pierścienia morfolinowego linezolidu. Dynamika podstawnika morfolinowego dla obu form polimorficznych ulega spowolnieniu poniżej temperatury pokojowej, a w temperaturze 203 K jest całkowicie zahamowana. Jednocześnie ruchów tych nie zaobserwowano w krystalicznych formach syntetycznych prekursorów badanego antybiotyku. Analiza z wykorzystaniem spektrometrii mas przeprowadzona dla linezolidu i jego pochodnych potwierdziła istotny wpływ, pozornie nieznaczących różnic w budowie strukturalnej, na stopień i rodzaj fragmentacji w warunkach jonizacji elektronami badanych układów organicznych. Szczególnie interesująca okazała się fragmentacja związku z podstawnikiem azydkowym, której skomplikowany charakter jest prawdopodobnie wynikiem procesów termicznych zachodzących przed procesem jonizacji właściwego związku.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki tych badań zostały opublikowane w *Journal of Pharmaceutical Sciences*, **2015**, *104*, 3883–3892.

31.2. Zastosowanie układów porfiryńowych jako matryc w technice MALDI w analizie związków niskocząsteczkowych.

Cel badania: Celem prowadzonych badań było poszukiwanie nowych metod analizy niskocząsteczkowych związków bioorganicznych za pomocą spektrometrii mas opierających się na jonizacji promieniem lasera (LDI, ang. Laser Desorption/Ionization).

Opis realizowanych prac: Przystępując do realizacji zadań skupiono się na metodach, w których proces desorpcji/jonizacji badanej próbki możliwy jest dzięki zastosowaniu odpowiednich powierzchni (metoda SALDI, ang. Surface-Assisted Laser Desorption/Ionization). Niestety brak odpowiednio zmodyfikowanych „płytek” do pomiarów SALDI uniemożliwił kontynuację badań. Alternatywnym podejściem było poszukiwanie związków chemicznych, które standardowo nie są stosowane jako matryce w technice MALDI (ang. Matrix-Assisted Laser Desorption/Ionization), a które charakteryzują się wyższą masą cząsteczkową niż klasyczne matryce MALDI (powyżej 600 Da). Podjęto próby opracowania warunków analizy kilku wybranych aminokwasów i dipeptydów wykorzystując jako związki wspomagające proces desorpcji/jonizacji grupę porfiryń zawierających w swej strukturze podstawniki o różnym charakterze chemicznym.

Opis najważniejszych osiągnięć: Uzyskane widma jednoznacznie potwierdzają możliwość stosowania związków z grupy porfiryń jako matryc MALDI do analizy związków niskocząsteczkowych. Uzyskane w tych warunkach widma charakteryzowały się znacznie mniejszą liczą pików o wartościach m/z poniżej 600, co zasadniczo upraszcza obraz w tym zakresie.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Obecnie trwają prace nad opracowaniem metodologii badań techniką MALDI dla kolejnych grup związków chemicznych m.in. nukletydów i nukleozydów z wykorzystaniem analogicznych matryc porfiryńowych.

31.3. Badanie stabilności kokryształów zaincorporowanych w mezoporowatej matrycy krzemowej SBA-15 z wykorzystaniem spektroskopii MRJ w ciecie stałym oraz spektrometrii mas.

Cel badania: Celem badania było wykorzystanie spektroskopii NMR oraz spektrometrii mas do analizy stabilności kokryształu naproksen:pikolinamid (NPX:PA) zarówno w procesie tworzenia jak i podczas umieszczania w SBA-15. Kokryształ NPX:PA otrzymuje się poprzez wstępne ucieranie komponentów w młynie kulowym, a następnie stopienie otrzymanej próbki. Również sposób umieszczenia kokryształu w matrycy krzemowej jest procesem termicznym. Kokryształ ponownie należy stopić, by mógł wnikać w pory nanokrzemionki (metoda „melting”).

Opis realizowanych prac: Analiza widm ^{13}C CP oraz ^{13}C SPE MAS NMR kokryształu nie wskazywała na degradację poszczególnych komponentów. Zmiany na widmach w stosunku do czystych substancji wynikały jedynie z interakcji między cząsteczkami w ciecie stałym. Wyniki te zostały potwierdzone za pomocą spektrometrii mas, którą cechuje większa czułość w stosunku do spektroskopii NMR w ciecie stałym. Widma mas wykonane zostały techniką jonizacji elektronami (Electron ionization – EI). Mimo, iż EI nie należy do „łagodnych” technik jonizacji i nie jest standardowo wykorzystywana do badania kokryształów, to widma mas badanej próbki odpowiadały tym uzyskanym dla osobnych składników. Spektrometria mas okazała się też znakomitym narzędziem w ocenie struktury kokryształu po wprowadzeniu w pory nanokrzemionki metodą melting. W tym przypadku, wtopiony w matrycę kokryształ został wmyty alkoholem metylowym, a przesącz poddany analizie MS. Zarejestrowane widma mas dla wmytego materiału jednoznacznie wykazały, że nie zachodzą żadne zmiany strukturalne, tj. degradacja, dekarboksylacja czy racemizacja w stosunku do kokryształu przed wtopieniem w matrycę.

Opis najważniejszych osiągnięć: Udało się otrzymać kokryształ NPX:PA i umieścić w mezoporowatej matrycy krzemowej SBA-15, udowodnić jego stabilność i skuteczność metody „melting”.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Przeprowadzone badania stabilności termicznej kokryształu NPX:PA są wstępem do bardziej zaawansowanych eksperymentów z wykorzystaniem SS NMR dotyczących umieszczania kokryształów w matrycach krzemowych i analizy oddziaływań lek-nośnik.

32. Zastosowania spektroskopii MRJ i spektrometrii mas w badaniach materiałów polimerowych.

32.1. Zastosowanie spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego w badaniach krzemowych układów polimerowych.

Cel badania: Analiza procesów dynamicznych i oddziaływań typu gość-gospodarz w układach makrocząsteczkowych poliedrycznych silseskwioksanów (POSS)

Opis realizowanych prac: Układy POSS są przykładem nieklasycznych polimerów, które charakteryzują się wysokim uporządkowaniem strukturalnym i periodycznością. W literaturze przedstawiane są jako potencjalne „kontenery” o dużym powinowactwie do gazów. Nasze badania dotyczyły analizy oddziaływań gość-gospodarz układów złożonych z klatek POSS usieciowanych siloksanowymi przekładkami o różnej długości, jednak jako cząsteczki gościa wykorzystane zostały rozpuszczalniki organiczne, tj. chloroform, octan etylu, toluen. Próbkę, otrzymaną przez namoczenie polimeru w odpowiednich rozpuszczalnikach, stanowiące różne wariacje modeli natywnych, zbadano pod względem nieuporządkowania molekularnego i analizy oddziaływań pomiędzy polimerową krzemowo-organiczną porowatą strukturą a cząsteczkami zaabsorbowanych rozpuszczalników. W tym celu wyznaczono i porównano czasy relaksacji podłużnej T_1 jąder ^{13}C i ^{29}Si dla utworzonych systemów.

Opis najważniejszych osiągnięć: Stwierdzono, że cząsteczki rozpuszczalnika mają istotny wpływ na zmiany w wartościach T_1 , zmniejszając czasy relaksacji dla węzłów POSS, jak również dla łącznika hybrydowego pomiędzy klatkami w zależności od jego długości.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Uzyskane wyniki zostały szczegółowo opisane w publikacji w *J. Phys. Chem. C* **2015**, *119*, 26575–26587. Ponadto stanowią część rozprawy doktorskiej mgra Tomasza Pawlaka.

32.2. Projektowanie i synteza polimerów do zastosowań biomedycznych.

Cel badania: Otrzymywanie polilaktydów modyfikowanych barwnikami 5-DTAF i kumaryną 7.

Opis realizowanych prac: Polilaktyd o $M_w = 2000$ z końcową grupą karboksylową został wyznakowany 5-(4,6-dichlorotriazynylo)aminofluoresceiną (5-DTAF). Barwnik ten związany kowalencyjnie z polimerem posłużył do utworzenia fluorescencyjnej powłoki polimerowej na liposomach stanowiących rusztowanie dla kulistych nano-objektów (nanolipopoliomersomów). Drugi model został utworzony w wyniku adsorpcji hydrofobowego związku [3-(2-Benzimidazolyl)-7-(diethylamino)coumarin] zwanego kumaryną 7 na sferycznych cząsteczkach polilaktydów. Otrzymane w ten sposób fluorescencyjne mikrosfery zostały przekształcone w obiekty mające kształt wąskich

„igieł”. Zmiana kształtu i rozmiarów nanocząstek, spowodowana przyłożeniem siły fizycznej, wpływa nie tylko na ich architekturę, ale diametralnie zmienia też ich biodostępność.

Opis najważniejszych osiągnięć: Przeprowadzone zostały doświadczenia związane z przenikaniem otrzymanych struktur przez błony komórkowe bakterii (na liniach komórkowych *HeLa cell*). Uzyskane wyniki wskazywały na wygaszoną w komórkach fluorescencję nanolipopolimerysomów znakowanych 5-DTAF, natomiast polilaktydowe „igły” znakowane kumaryną 7 łatwo wnikały w komórki zachowując silne własności fluorescencyjne barwnika.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wzmocnione fluorescencyjne nanolipopolimerysomy mogą znaleźć zastosowanie jako transportery związków terapeutycznych. Przeprowadzone badania będą kontynuowane w celu zastosowania polilaktydowych obiektów jako nośniki chemoterapeutycznych leków.

33. Spektroskopia MRJ w ciele stałym jako narzędzie w badaniach organizacji fazy substancji polidispersyjnych.

33.1. Badanie wpływu stereochemii na samoorganizację w ciele stałym diastereomerycznych diketopiperazyn: cyklo-(L-Tyr-Ala) i cyklo(L-Tyr-D-Ala).

Cel badania: Celem prac była synteza cyklicznych dipeptydów: cyklo-(L-Tyr-Ala) i cyklo-(L-Tyr-D-Ala), zorganizowanie otrzymanych układów w struktury o zdefiniowanej i jednorodnej morfologii oraz porównanie budowy i właściwości.

Opis realizowanych prac: Wybrane do badań diketopiperazyny (DKP) ze względu na obecność pierścieni aromatycznych i grup zdolnych do tworzenia wiązań wodorowych (C=O, N-H), w środowisku rozpuszczalników woda/metanol (1:1, v/v) tworzyły krystaliczne struktury uporządkowane w nano- i mikro rurki. Budowa i rozmiary otrzymanych nano i mikrosystemów zostały określone na podstawie zdjęć z mikroskopu skaningowego (SEM), a struktury krystalograficzne za pomocą proszkowej analizy rentgenograficznej (PXRD). Zbadano również stabilność termiczną tych układów. Przeprowadzono badania temperaturowe w zakresie 25-160°C z wykorzystaniem eksperymentów NMR w ciele stałym (¹³C CP MAS, ¹H VF MAS), spektroskopii w podczerwieni (FTIR) i dichroizmu kołowego (CD). Ponadto, widma ¹H VF MAS NMR okazały się doskonałym narzędziem do zbadania kompozycji kryształów i oceny zawartości wody.

Opis najważniejszych osiągnięć: Z analizy rentgenograficznej wynikało, że diketopiperazyny L-Tyr-Ala i L-Tyr-D-Ala krystalizują w tej samej grupie przestrzennej, tworząc kryształy o zbliżonych wymiarach. Różnica wynikająca z przeciwnej konfiguracji centrum asymetrycznego alaniny miała jednak znaczący wpływ na tworzenie struktur o wyższej rzędowości. Cyklo-(L-Tyr-Ala) organizowała się w struktury rurkowe o średnicach wewnętrznych mniejszych niż 5 mikrometrów, natomiast cyklo-(L-Tyr-D-Ala) tworzyła systemy których średnice otworów sięgały nawet do 100 mikrometrów. Tendencja ta niewątpliwie mała wpływ na zdolność penetracji i wnikania cząsteczek wody w kryształy modelowych związków. Widma ¹³C CPMAS i ¹H NMR VF MAS dla próbek przed i po ogrzewaniu wykazały zmiany w aranżacji molekularnej badanych układów spowodowane migracją wody z sieci krystalicznej, przy czym dla układu z D-alaniną uwalnianie wody było procesem odwracalnym. Cząsteczka wody mogła być ponownie wprowadzona do sieci krystalicznej cyklo-(L-Tyr-D-Ala) przez dyfuzję par. Proces ten został potwierdzony za pomocą analizy DSC, ¹³C CP MAS i ¹H NMR VF MAS.

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Wyniki tych badań zostały opublikowane w *Cyst. Growth Des.*, 2015, 15, 5138–5148.

33.2. Analiza strukturalna carvedilolu.

Cel badania: Celem badań było zakończenie projektu związanego z ustaleniem dokładnej struktury dostępnych form polimorficznych carvedilolu.

Opis realizowanych prac: Carvedilol – lek z grupy beta-blokerów może istnieć w postaci dwóch form polimorficznych. Dla próbek otrzymanych wg danych patentowych przeprowadziliśmy szczegółową analizę NMR wspartą obliczeniami teoretycznych parametrów ekranowania metodą GIPAW. Na podstawie pomiarów ¹³C CP-MAS i ¹³C 2D PASS wyznaczono główne elementy tensora przesunięcia chemicznego. Otrzymane wartości porównano z danych uzyskanymi za pomocą modelowania molekularnego dla różnych form krystalicznych carvedilolu dostępnych w bazach CSD.

Opis najważniejszych osiągnięć: Formy polimorficzne carvedilolu udało się jednoznacznie przypisać jako forma bezwodna i hemihydrat

Wykorzystanie uzyskanych wyników: Niestety nie udało się opublikować wyników naszych badań. Ubiegła nas w tym grupa naukowców z Brazylii, która przeprowadziła podobną analizę dochodząc do tych samych wniosków. W połowie września 2015 ukazała się na ten temat praca w *Journal Pharmaceutical sciences*, DOI 10.1002/jps.24641.

REALIZACJA GRANTÓW

Najważniejsze osiągnięcia 2015 roku w realizacji projektów badawczych MNiSW oraz NCN

- Opracowano procedury syntezy (jako prekursorów chiralnych *N,N*-diazakarbenów) racemicznych i optycznie czynnych: *orto*-(*t*-butylofenylofosfinylo)aniliny, *orto-N*-(*t*-butylofenylofosfinylo)aniliny, *orto*-(*S-t*-butylofenylofosfinylo)aniliny i *orto*-(*Se-t*-butylofenylofosfinylo)aniliny. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/06/A/ST5/00227, MAESTRO. Kierownik grantu: prof. dr hab. Józef Drabowicz.
- Opracowano procedurę syntezy szeregu diastereomerycznie czystych tlenków i siarczków oksazafosforinanowych pochodnych 1-[α -(*N*-1-feniloetylo)]benzylo-2-naftolu. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/06/A/ST5/00227, MAESTRO. Kierownik grantu: prof. dr hab. Józef Drabowicz.
- Opracowano procedurę syntezy szeregu enancjomerycznie czystych tlenków *t*-butylofenyloarylofosfin. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/06/A/ST5/00227, MAESTRO. Kierownik grantu: prof. dr hab. Józef Drabowicz.
- Opracowano procedurę syntezy enancjomerycznie czystych halogenków *t*-butylofenylofosfinylowych w reakcji bezpośredniego halogenowania optycznie czynnego tlenku drugorzędowej *t*-butylofenylofosfiny Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/B/ST5/05329, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Józef Drabowicz.
- Opracowano metodę i zsyntetyzowano szereg sulfotlenków 4(5)-izoselenocyjaniano-1-butylo(pentylo)-polifluoroalkilowych i polifluoroarylowych i uzyskano wyniki badań biologicznych przeprowadzonych w Narodowym Instytucie Leków, które dowiodły, że niektóre z tych związków wykazują wyższą, niż naturalny sulforafan, skuteczność przeciwnowotworową na wybranych liniach komórkowych, przy niższej toksyczności dla komórek prawidłowych. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/N/ST5/00140, PRELUDIUM. Kierownik grantu: mgr Tomasz Cierpień.
- Uzyskano nową, heksagonalną formę krystaliczną enzymu CAL-B w postaci natywnej. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/B/ST4/00075, OPUS. Kierownik grantu: dr hab. Jarosław Błaszczak.
- Uzyskano wyniki pozwalające na zaproponowanie wewnątrzcząsteczkowego uzgodnionego mechanizmu badanego przegrupowania – migracji ugrupowania fosforylowego - i potwierdzono ten mechanizm za pomocą obliczeń DFT. Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01589, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Wanda Halina Midura.
- Zastosowano po raz pierwszy w syntezie organicznej podwójną reakcję kondensacji McMurry tetraaldehidów aromatycznych, prowadzącą w wyniku cyklizacji do syntezy nieliniowo skondensowanych poliacenów typu helicenowego. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/N/ST5/00169, PRELUDIUM. Kierownik grantu: mgr Joanna Skalik.
- Opracowano warunki prowadzenia dwóch reakcji elektrofilowej cyklizacji *o*-acetalo-diarylometanoli oraz *o*-formylo-diarylometanów z udziałem ultradźwięków (6.8 M HCl_{aq}, acetonitryl, 45-50°C), które pozwalają na ilościowe otrzymanie skondensowanych policyklicznych węglowodorów aromatycznych, a jednocześnie stanowią pierwszy znany przykład reakcji elektrofilowej cyklizacji i pierwszy przykład reakcji Bradshera wspomaganą przez ultradźwięki. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/07/N/ST5/01985, PRELUDIUM. Kierownik grantu: mgr Emilia Kowalska.
- Opracowanie dwóch nowych tio-modyfikacji reakcji cyklizacji typu Friedela-Craftsa i reakcji Bradshera prowadzących do otrzymania tiopodstawionych w pierścieniu aromatycznym i niepodstawionych (hetero)antracenów. Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01610, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Piotr Bałczewski.
- Przeprowadzono badania nad cykloaddycją izobenzofuranów z estrem dietylowym kwasu (*Z*) i (*E*) [2-(dietyloksy-fosforylo)-winylo]-fosfonowego oraz estrem dietylowym kwasu (dietyloksy-fosforyletynylo)-fosfonowego. Określono stereochemię tej cykloaddycji metodami NMR. Zsyntezowano kwas fosfonoepituriferowy. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/B/ST5/00738, OPUS. Kierownik grantu: dr Marek Koprowski.

- Zsyntetyzowano serię pochodnych fenylenowinylenowych i styrylostilbenowych oraz przebadano ich cytotoksyczność wobec 7 linii komórkowych, a badania komórkowej lokalizacji distyrylostilbenu (za pomocą mikroskopii fluorescencyjnej i konfokalnej) wykazały, że związek ten lokalizuje się w siateczce śródplazmatycznej, aparatach Golgiego i w zewnętrznej błonie mitochondrialnej. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/B/ST5/00364, OPUS. Kierownik grantu: dr hab. Arkadiusz Chworoś.
- Opracowano sposób wykrywania obecności modyfikowanych (zdesulfurowanych) nukleozydów w syntetycznym modelowym fragmencie tRNA lub w tRNA wyizolowanym z komórek drożdży lub bakterii (metodą odwrotnej transkrypcji), oraz metodę wykrywania obecności atomów siarki w badanym kwasie nukleinowym (elektroforeza w żelu poliakrylamidowym zawierającym związek rtęci), a przy pomocy zaawansowanych metod spektrometrii mas (3Q MRM) potwierdzono obecność produktów desulfuracji mcm5S2U-tRNAGlu do mcm5H2U-tRNAGlu i mcm5U-tRNAGlu w komórkach drożdży poddanych działaniu H₂O₂ w warunkach naśladujących stres oksydacyjny. Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/B/ST5/02669, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot.
- Przeprowadzono próby krystalizacji kompleksów zawierających cząsteczkę DNAzemu 10-23 w różnych wariantach, m.in. w obecności białek, uzyskując kryształy potencjalnego kompleksu DNAzym-protamina, dla których jednak nie udało się zarejestrować użytecznych danych dyfrakcyjnych. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/B/NZ1/01661, OPUS. Kierownik grantu: dr Rafał Dolot.
- Wykonano nadekspresję białka SelU w bakteriach *E. coli* i zbadano jego aktywność enzymatyczną w reakcji geranylowania S2U-RNA, gdzie wykazano, iż aktywność SelU zależy od obecności jonów Mg²⁺ w środowisku reakcji, a białko SelU wiąże wewnątrzkomórkowy bakteryjny tRNALys i tRNAGlu, który zawiera w pozycji wahadłowej pochodne S2U, natomiast nie wiąże bakteryjnego tRNAGln, który nie zawiera S2U. Grant NCN, nr umowy UMO-2014/13/B/ST5/03979, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot.
- W dwóch miesiącach należących do roku sprawozdawczego skupiono się na przygotowaniu rozprawy doktorskiej (obrona odbyła się w marcu 2015), przygotowaniu publikacji (dwie złożono do redakcji), a także opracowano raport końcowy. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/N/NZ7/01174 PRELUDIUM. Kierownik grantu: dr Karolina Królewska.
- The immunosuppressive activity of cancer derived exosomes affecting the expression of critical surface receptors and cytokines of antigen presenting cells can be increased by preincubation of the exosomes, indicating the supposable contribution of miRNAs. Grant NCN, nr umowy UMO-012/05/B/NZ2/00574, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Markus Döchler
- Wykazano, że projektując sondy molekularne typu PS-(DNA/LNA) można, zależnie od potrzeb, stosować oligomery o dowolnej konfiguracji absolutnej atomów fosforu, bez obaw o trwałość termodynamiczną utworzonych dupleksów antyrównoległych (co ma istotne znaczenie w planowaniu badań dotyczących oddziaływań oligonukleotydów z innymi biomolekułami) oraz analizując krzywe mięknięcia po raz pierwszy uzyskano istotne przesłanki obecności homopirymidynowych oligonukleotydów DNA w trypleksach równoległych, w których nić centralną stanowiły homopurynowe tiofosforanowe oligomery [All-RP-PS]-(DNA/LNA). Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/B/ST5/02671, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Piotr Guga.
- Wykazano, że w komórkach K562 znajduje się funkcjonalny receptor P2X7, który po aktywacji przy użyciu BzATP może być użyty do transportu AMPS do wnętrza komórek. Grant NCN, nr umowy UMO-2013-/09/B/ST5/03612, OPUS. Kierownik grantu: dr Agnieszka Krakowiak.
- Wykorzystując poszczególne izomery monomerów OTP-DMT(*G*N) otrzymano stereozdefiniowane związki typu (*G*N)_{PS}T, przeprowadzono korelację (metodami chemicznymi i z wykorzystaniem stereospecyficznych enzymów Nukleazy P1 i Fosfodiesterazy z jadu węża) pomiędzy mobilnością chromatograficzną P-diastereoizomerów fast i slow OTP-DMT(*G*N) a konfiguracją absolutną na atomie fosforu i węgla w związkach (*G*N)_{PS}T i uzyskano przesłanki, że izomery (P-fast; C_{-,+})*G*N są prekursorami wiązań internukleotydowych z atomami fosforu o konfiguracji R_p, natomiast z izomerów (P-fast; C_{-, -})*G*N powstają wiązanie internukleotydowe z atomami fosforu

o konfiguracji S_p. Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/B/ST5/02670, OPUS. Kierownik grantu: dr Agnieszka Tomaszewska.

- Zsyntezowano monomer oksatiafosfolanowy – pochodną DMT-N₂,N₂-dimetylo-2'-dG, za pomocą HPLC rozdzielono P-diastereoizomery (ich czystość diastereoizomeryczną potwierdzono za pomocą ³¹P NMR) a uzyskane monomery fast i slow skondensowano z 3'-O-Ac-tymidyną wobec DBU, otrzymując zablokowane dinukleotydy, które po odblokowaniu i oczyszczeniu metodą HPLC zostały scharakteryzowane metodą spektrometrii masowej i będą wykorzystane do wykonania korelacji pomiędzy mobilnością chromatograficzną monomerów (fast i slow) a konfiguracją absolutną atomu fosforu w tworzonym wiązaniu internukleotydowym. Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01581, OPUS. Kierownik grantu: dr Anna Maciaszek.
- Przeprowadzono badania skringowe aktywności cytotoksycznej 14 nowych pochodnych z grupy benzo[b]furanów i dikarboksyimidów (w stężeniu 100 μM) w stosunku do komórek nowotworowych raka szyjki macicy HeLa i przewlekłej białaczki szpikowej K562, a dla związków wykazujących znaczną cytotoksyczność (poniżej 50% przeżywalności) wykonano dalsze badania cytotoksyczności w pełnym zakresie stężeń i wyznaczono parametry IC₅₀. Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/B/NZ7/00966, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot.
- W okresie sześciu tygodni realizacji projektu w 2015 roku zaprojektowano modelowe oligonukleotydy DNA, które będą postsyntetycznie znakowane klastrami boru i zdecydowano, że w pierwszym etapie metodą amidofosforynową na fazie stałej zsyntetyzowane zostaną krótkie oligomery (tetramery) zawierające wszystkie cztery jednostki kanoniczne, w tym jednostkę tymidyny zawierającą resztę alkinową w pozycji C5 nukleozasady lub 2'-reszty cukrowej. Grant NCN, nr umowy UMO-2015/16/W/ST5/00413, SYMFONIA. Kierownik grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot.
- Badając kopolimeryzację odwracalną metodami stochastycznego (Monte Carlo) i deterministycznego (całkowanie numeryczne kinetycznych równań różniczkowych) modelowania numerycznego przygotowano podstawy do przygotowania na dalszym etapie realizacji grantu metody hybrydowej modelowania komputerowego. Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/B/ST5/05321, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Ryszard Szymański.
- Opracowanie warunków spontanicznego wytrącania regularnych mikrosfer w procesie stereokompleksacji PLLA i PDLA zakończonych grupą (grupami) –COOH w obecności jonów metali Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01618, OPUS. Kierownik grantu: dr hab. M. Bednarek.
- Opracowanie metody kontrolowanej syntezy polilaktydów gwiazdzistych o różnej liczbie ramion w połączeniu z wydajną metodą modyfikacji hydroksylowych grup końcowych Grant NCN, nr umowy UMO-013/09/B/ST5/03616, OPUS. Kierownik grantu: dr hab. Tadeusz Biela.
- Opracowanie metody kontrolowanej syntezy polilaktydów gwiazdzistych stabilizowanych wobec czynników termicznych i oksydacyjnych. Grant NCN, nr umowy UMO-2013/09/B/ST5/03619, OPUS. Kierownik grantu: dr hab. Grzegorz Łapienis.
- Opracowano metodę otrzymywania cząstek elipsoidalnych i kontrolowanym współczynnikiem kształtu z mikrosfer o budowie rdzeń-powłoka zawierających w powłoce segmenty hydrofilowego poliglicydolu. Grant NCN, nr umowy UMO-2014/13/B/ST5/04376, OPUS. Kierownik grantu: dr hab. Teresa Basińska
- Opracowano metodę syntezy nowych materiałów hybrydowych z wykorzystaniem połączeń silseskwioxanowych, zbadano specyficzne właściwości fizykochemiczne otrzymanych poli(silseskwioxanów) jak również przedstawiono możliwości ich wykorzystania (tworzenie cienkich warstw polimerowych i nanostruktur dzięki obecności grup bocznych zdolnych do oddziaływań supramolekularnych). Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/B/ST5/02672, OPUS. Kierownik grantu: dr hab. Anna Kowalewska.
- Opracowano metodę syntezy mikrosfer ceramicznych krzemowęglilotlenkowych w wyniku ceramizacji mikrosfer polisiloksanowych w temperaturach do 1400°C. Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01615, Kierownik grantu: prof. dr hab. Stanisław Słomkowski.

- Zbadano mechanizmy syntezy nanocząstek srebra i palladu oraz ich dwuskładnikowych stopów w obecności amin, wychodząc z odpowiednich soli karboksylowych tych metali jako prekursorów atomów Ag i Pd, nowymi metodami redukcji z zastosowaniem wodoru oraz wodorosilanów. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/B/ST5/00366, OPUS. Kierownik grantu: dr hab. Paweł Uznański.
- Opracowano syntezy nowych porowatych mikrosfer polisiloksanowych zawierających pallad. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/07/N/ST5/01980, PRELUDIUM. Kierownik grantu dr Piotr Pospiech.
- Rozpoczęto badania zachowania sieci molekularnej w fazie amorficznej PE pod wpływem wysokich odkształceń ściskających. Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/B/ST8/04306. OPUS. Kierownik grantu prof. dr hab. Zbigniew Bartczak.
- Gruntownie przeanalizowano oraz wykazano wpływ zjawiska kawitacji na wartość naprężenia/odkształcenia na granicy plastyczności, intensywność fragmentacji lamel, dynamikę reorientacji komponentu krystalicznego oraz amorficznego, stopień orientacji krystalitów na różnych etapach deformacji oraz ilość ciepła generowaną na skutek aktywacji poszczególnych mechanizmów deformacji plastycznej wybranych polimerów częściowo krystalicznych. Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/D/ST8/04156, SONATA. Kierownik grantu dr Artur Różański.
- Wytworzono partie tkanin bawełnianych i poliestrowych z przewodzącą siecią nanorurek węglowych o przewodnictwie poniżej $1\text{k}\Omega/\text{cm}^2$, które zostały wykorzystane do wytworzenia na ich powierzchni polipirolu metodą elektrochemiczną. Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/B/ST8/06126, Kierownik grantu: dr Tomasz Makowski.
- Wytworzono ziarna polipropylenu z zmniejszoną gęstością splątania makrocząsteczek, które przekształcono w nanowłókna, poprzez ścinanie mechaniczne w środowisku innego polimeru, w nanowłókna, w wyniku czego otrzymano nanokompozyty typu all-polymer. Grant NCN, nr umowy UMO-2012/04/A/ST5/00606, MAESTRO. Kierownik grantu: prof. dr hab. Andrzej Gałęski.
- Zaobserwowano różnice w strukturze lamelarniej izotaktycznego polipropylenu z dodatkiem różnych środków zarodkujących skryształizowanego w formie gamma pod wysokim ciśnieniem. Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/N/ST8/03756, PRELUDIUM. Kierownik grantu: mgr Przemysław Sowiński.
- Zaimplementowano techniki odwrotnej detekcji oraz sekwencje impulsowe typu Back-to-Back, PMLG-JHETCOR i RFDR do analizy struktury i oddziaływań w układach typu gość-gospodarz. Grant NCN, nr umowy UMO- 2011/03/N/ST4/01721, PRELUDIUM. Kierownik grantu: mgr inż. Piotr Paluch.
- Za pomocą obliczeń teoretycznych udowodniono precyzję i poprawność sekwencji impulsowej CPVC (Cross Polarization Variable Contact) w analizie struktury i lokalnej dynamiki złożonych układów bioorganicznych. Grant NCN, nr umowy UMO-2014/13/B/ST4/03050, OPUS. Kierownik grantu: prof. dr hab. Marek Potrzebowski
- Metodą „melting” wprowadzono cyklofosfamid w pory mezoporowatej nanokrzemionki MCM-41, co potwierdzono z wykorzystaniem eksperymentów NMR w ciele stałym. Grant NCN, nr umowy UMO-2014/13/N/ST5/03444, PRELUDIUM. Kierownik grantu: mgr Ewa Skorupska.
- Wykazano niezwykłą wrażliwość kryształów katechiny na zmiany zawartości wody w otoczeniu. Grant NCN, nr umowy UMO-2015/16/S/ST4/00466, FUGA. Kierownik grantu: dr Marta Dudek.
- Przeprowadzono szereg reakcji typu Dielsa-Aldera dla wcześniej zsyntezowanych i sfunkcjonalizowanych porfiryn. Określono wpływ podstawników o różnym charakterze elektronowym i sterycznym na reaktywność układów porfirynoidowych. Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/N/ST5/02040, PRELUDIUM. Kierownik grantu: mgr Justyna Śniechowska.

Inne (FNP, NCBiR, OPI)

- Synteza racemicznej pochodnej PTA zawierającej pierwszorzędową grupę hydroksylową PTA-CH₂OH i zastosowanie jej w reakcji enzymatycznego acetylowania. Projekt POMOST/2013-8/9 Kierownik grantu: dr Małgorzata Kwiatkowska.
- Opracowanie metody kontrolowanej syntezy kopolimerów triblokowych: PLA-TMC-PLA i TMC-PLA-TMC. Grant NCBiR, nr umowy PBS2/A1/12/2013; projekt koordynowany przez Politechnikę Warszawską. Kierownik Zadania: prof. dr hab. Stanisław Słomkowski; pełnomocnik Kierownika: prof. dr hab. Andrzej Duda.
- Zmodyfikowano kilka termoplastycznych elastomerów w celu podwyższenia ich wytrzymałości w stanie stopionym, uzyskania materiałów zdolnych do spieniania metodą ciągłego wytłaczania i otrzymywania pianek zamkniętokomorowych. Kierownik zadania: prof. dr hab. Andrzej Gałęski.
- W ramach realizacji projektu dokonano zgłoszenia patentowego polskiego (P. Bałczewski, J. Skalik, B. Nawrot, M. Cieślak, J. Kaźmierczak-Barańska; Zastosowanie medyczne soli tryfenylofosfoniowych, Zgłoszenie (RP) P.413297, 28/07/2015) i jednego europejskiego (P. Bałczewski, J. Skalik, B. Nawrot, M. Cieślak, J. Kaźmierczak-Barańska; Medical use of triphenylphosphonium salts Zgłoszenie (EPO) EP15460043.1, 13.08.2015). Grant OPI, Nr umowy: POIG.01.03.02-10-022/11. Kierownik grantu: prof. dr hab. Stanisław Słomkowski. Realizatorzy grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot, prof. dr hab. Piotr Bałczewski.

BADANIA REALIZOWANE W RAMACH GRANTÓW

Granty Narodowego Centrum Nauki

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/B/ST5/00738

Nowe podejście do syntezy fosfonowych analogów lignanów. Totalna synteza kwasu fosfonoturiferowego.

Kierownik grantu dr Marek Koprowski OPUS

Grant realizowany od 04.03.2013 do 03.03.2016

Przeprowadzono badania nad reakcją cykloaddycji izobenzofuranu (5-(3,4,5-trimetoksy-fenyl)-furo[3',4':4,5]benzo[1,2-d][1,3]dioksolu) z następującymi dienofilami zawierającymi dwa podstawniki fosfonianowe, które umożliwią w dalszym etapie syntezę kwasów fosfonoturiferowego i izomerycznego fosfonoepituriferowego:

- estrem dietylowym kwasu (Z) [2-(dietoksy-fosforylo)-winylo]-fosfonowego
- estrem dietylowym kwasu (E) [2-(dietoksy-fosforylo)-winylo]-fosfonowego
- dietylowym estrem kwasu (dietoksy-fosforyletynylo)-fosfonowego (bis(dietoksyfosforylo)acetylenem)

Zoptymalizowano warunki powyższej reakcji Dielsa-Aldera w celu obniżenia wydajności ubocznych reakcji aromatyzacji-eliminacji. Wyodrębniono odpowiednie stereoizomery „endo” i „exo” cykloadduktów. Określono ich stereochemię metodami NMR. Przeprowadzono badania nad reakcją redukcji adduktów. Otrzymane cykloaddukty są bezpośrednimi prekursorami kwasów fosfonoturiferowego i fosfonoepituriferowego.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/B/ST4/00075

Badania strukturalne kompleksów enzymów hydrolitycznych z substratami heteroorganicznymi i ich analogami.

Kierownik grantu dr hab. Jarosław Błaszczak, OPUS

Grant realizowany od 04.03.2013 do 03.03.2016

W roku sprawozdawczym skupiono się nad krystalizacją lipazy CAL-B, zakupionej w amerykańskiej firmie Hampton Research, o jakości określonej przez producenta jako 'crystallization grade'. Warunki krystalizacji podane przez producenta jako pewnik, niestety nie przyniosły żadnych kryształów. Dlatego prace krystalizacyjne lipazy CAL-B zaczęto ponownie od zera, tzn od skringingu warunków krystalizacji natywnej formy białka. Prace te prowadzone są w Pracowni Badań Strukturalnych Instytutu Biochemii Technicznej Politechniki Łódzkiej. Pracownia ta posiada bowiem specjalnie przeznaczone, do celów przygotowania i prowadzenia krystalizacji, pomieszczenie o stałej temperaturze i kontrolowanej wilgotności powietrza. Skringing warunków krystalizacji natywnej formy białka prowadzony był przy użyciu komercyjnie dostępnych, gotowych specjalnych zestawów roztworów.

Dotychczasowe prace doprowadziły do uzyskania nowej, heksagonalnej formy krystalicznej enzymu w postaci natywnej. Krystalizacja i analiza strukturalna zostały zakończone, struktura została zdeponowana w PDB (Protein Data Bank), gdzie nadano jej kod 4zv7. Publikacja dotycząca tej struktury została przyjęta do czasopisma Acta Biochimica Polonica, i obecnie jest w druku po ostatecznej korekcie. Struktura została też zaprezentowana w 2015 roku w formie posteru na międzynarodowej konferencji HALCHEM-7 (7th International Meeting on Halogen Chemistry).

Oprócz wspomnianej nowej formie heksagonalnej, uzyskano również znaną już formę rombowa postaci wolnej enzymu. Kryształy obydwu tych form posłużyły w dalszych etapach prac do spodziewanego otrzymania odpowiednich kryształów kompleksów z zsyntetyzowanymi w naszym Zakładzie heteroorganicznymi ligandami, dla których enzym wykazywał udokumentowaną (w postaci publikacji) aktywność. Kompleksacja prowadzona była metodą tzw. nasączenia ligandu do gotowych już kryształów postaci wolnej enzymu.

Niestety próby nasączenia ligandu nie doprowadziły do otrzymania kryształów, które zawierałyby ligand obecny w 100 procentach obsadzenia w kryształach. Zaobserwowano jedynie niewielkie rozmycia chmury gęstości elektronowej w centrum aktywnym, co wskazuje że metoda nasączenia ligandów do gotowych kryształów formy wolnej nie najlepiej zdaje egzamin.

Aktualnie prowadzone są prace nad uzyskaniem kompleksów białka (z wyżej wspomnianymi heteroorganicznymi ligandami) przez ko-krystalizację (współkrystalizację) tych ligandów z białkiem. Dotychczasowe prace nie doprowadziły do otrzymania kryształów w formie 100-procentowego kompleksu białka z ligandem. W uzyskanych do tej pory kryształach tą metodą, obserwuje się jedynie śladową obecność ligandów w centrum aktywnym, w którym nadal w znaczącym stopniu dominuje obecność cząsteczek wody.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/N/ST5/00169

Nowe podejście do syntezy nieliniowo skondensowanych policyklicznych węglowodorów (hetero)aromatycznych z użyciem (hetero)aromatycznych di- i tetraaldehydów jako prekursorów.

Kierownik grantu dr Joanna Skalik, PRELUDIUM

Grant realizowany od 18.03.2013 - 17.03.2015

Synteza nowych nieliniowo skondensowanych policyklicznych węglowodorów (hetero)aromatycznych w wyniku zastosowania sekwencji trzech reakcji: cyklizacji Friedela-Craftsa/sprzęgania Suzuki-Miyaura/pojedynczego sprzęgania McMurry. Opracowanie syntezy nieliniowo skondensowanych policyklicznych węglowodorów (hetero)aromatycznych. W oparciu o o-dibromowane (hetero)aromatyczne acetaldehydy otrzymane z blokowanych o,o-dibromo podstawionych dialdehydów aromatycznych, zostały zsyntezowane związki typu helicenowego w sekwencji reakcji krzyżowego sprzęgania aryl-aryl Suzuki-Miayury orto-formylo podstawionych (hetero)aromatycznych kwasów boronowych/reakcji McMurry dwóch grup formyloowych. Opracowano nowe podejście do syntezy nieliniowych pochodnych poliacenów typu-helicenowego, dzięki zastosowaniu kombinacji reakcji podwójnego sprzęgania Suzuki-Miayury o,o-dibromo dialdehydów oraz o-formylo podstawionych (hetero)aromatycznych kwasów boronowych a następnie podwójnej wewnątrzcząsteczkowej reakcji kondensacji typu McMurry otrzymanych tetraaldehydów (hetero)aromatycznych.

Podwójna reakcja kondensacji McMurry tetraaldehydów aromatycznych została po raz pierwszy zastosowana w syntezie organicznej jako skuteczne narzędzie syntetyczne do syntezy nieliniowo skondensowanych poliacenów. Podwójna reakcja sprzęgania Suzuki-Miayury okazała się również selektywną i wydajną reakcją prowadzącą do tetraaldehydów, które nie były zanieczyszczone produktami monosprzęgania.

Kombinacja reakcji podwójnego sprzęgania Suzuki-Miayury i podwójnej wewnątrzcząsteczkowej reakcji kondensacji typu McMurry została również po raz pierwszy zastosowana w syntezie organicznej. Wyniki uzyskane w trakcie realizacji niniejszego projektu badawczego były upowszechniane w postaci komunikatów i posterów na konferencjach krajowych.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/06/A/ST5/00227

Nowe katalizatory metaloorganiczne i/lub organokatalizatory oparte na połączeniach ze stereogenicznym hiperwalentnym lub/i tetrakoordynacyjnym heteroatomem.

Kierownik grantu prof. dr hab. Józef Drabowicz MAESTRO

Grant realizowany od 29.04.2013 do 28.04.2017

Kontynuowane były badania and otrzymaniem nowej grupy optycznie czynnych analogów katalizatorów Grubbsa II generacji posiadających w swoich strukturach chiralny ligand *N,N*-diazakarbenowy otrzymany odpowiednio z *orto*-(*t*-butylofenylofosfinylo)aniliny, *orto-N*-(*t*-butylofenylofosfinylo)aniliny, *orto*-(*S-t*-butylofenylofosfinylo)aniliny i *orto*-(*Se-t*-butylofenylofosfinylo)aniliny. Syntezy nasyconych symetrycznie podstawionych soli imidazolidynowych jako substratów do generowania karbenów *N*-heterocyklicznych oparta była na reakcji kondensacji *N,N*-etylenowych bis-podstawionych pochodnych *orto*- lub *para*-fosfinylomerkaptioaniliny z ortomrówczanem trietylowym w obecności soli nieorganicznej.

Syntezy szeregu diastereomerycznie czystych tlenków i siarczków oksazafosforinanowych pochodnych 1-[α -(*N*-1-fenylotetylo)]benzylo-2-naftolu oparte zostały na reakcji tego aminonaftolu z odpowiednimi prekursorami fosforoorganicznymi.

Reakcja krzyżowego sprzęgania optycznie czynnego fosfinitlenku *tert*-butylofenyloowego i 2-jodo(bromo)anilin (katalizowana kompleksami wybranych metali, została wykorzystana do otrzymania serii enancjomerycznie czystych fosfinitlenków arylo-*tert*-butylofenyloowych (Ar=3-NH₂-C₆H₄, 4-NH₂-C₆H₄, 4-CF₃-C₆H₄, 9-C₁₄H₉, 4-OMe-C₆H₄, 4-*t*Bu-C₆H₄, 2-NO₂-C₆H₄ 1-C₁₀H₇, 2,6-(CH₂O-bis(4-CH₃-C₆H₄)₂-C₆H₄, 2-(CH₂OH)-C₆H₄, 2-C₄H₃S. (wyd. 94%, >99% ee). Otrzymano również pochodną aniliny ze stereogenicznym sulfinylowym atomem siarki w pozycji *meta* w reakcji diastereoizomerycznie czystego *p*-toluenosulfonianu mentylu z odpowiednim związkiem Grignarda.

Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01610

Tiomodyfikacja nowej reakcji cyklizacji typu Friedela-Craftsa i badanie właściwości optoelektrycznych tiopodstawionych (hetero)acenów.

Kierownik grantu prof. dr hab. Piotr Bałczewski, OPUS

Grant realizowany od 22.08.2014 do 21.08.2017

Tiomodyfikacja reakcji Friedela-Craftsa jest nową modyfikacją tej reakcji, opartą o elektrofilową cyklizację (*orto*-dithioacetaloarylo)arylometanotioeterów zawierających atomy siarki w ugrupowaniach dithioacetalowym i tioeterowym. Prowadzone badania skupiają się na syntezie tych połączeń, które następnie w obecności kwasu Lewisa FeCl₃/KI, w temperaturze wrzenia MeOH przekształcane są w sulfenylowe pochodne poliacenów. Wykonano kolejne przykłady tej reakcji.

Tiomodyfikacja reakcji Bradshera polega na reakcji elektrofilowej cyklizacji (*orto*-dithioacetaloarylo)arylometanów. Prowadzi ona do niepodstawionych w pierścieniu aromatycznym grupami SR poliacylenów. Ze względu na obecność bloku 1,3-ditianylowego w (*S,S*-acetalo)diarylometanolach, kluczową reakcją była selektywna redukcja II rz. grupy hydroksylowej. Okazało się, że w zależności od rodzaju podstawników w pierścieniach aromatycznych obserwuje się różny stopień kompleksowania atomów siarki w bloku dithioacetalowym przez jodek cynku, a tym samym jego różną stabilność w warunkach redukcji grupy hydroksylowej za pomocą NaBH₃CN (otwarcie pierścienia towarzyszące redukcji grupy OH). Dowiedziono, że występowanie alkoksylowych podstawników elektronodonorowych w pierścieniu związanym bezpośrednio z resztą dithioacetalową wpływa na jednoczesne kompleksowanie atomu siarki i tlenu co sprzyja otwarciu pierścienia, podczas gdy selektywna redukcja grupy -OH promowana jest obecnością takich samych podstawników, ale w pierścieniu niezwiązanym z blokiem *S,S*-acetalowym. Otrzymane w wyniku redukcji (*S,S*-acetalo)diarylometany posłużyły w dalszym etapie do reakcji wewnątrzcząsteczkowej cyklizacji, która stanowi nieopisaną w literaturze tiomodyfikację znanej reakcji cyklizacji Bradshera *orto*-aldehidów aromatycznych.

Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01589

Przegrupowanie w cyklopropylowych fosfonianach a syntezy kwasów cyklopropyloaminofosfonowych.

Kierownik grantu prof. Wanda Halina Midura, OPUS

Grant realizowany od 26.09.2014 do 25.09.2017

Kontynuując badania dotyczące 1,2 migracji grupy fosforylowej w cyklopropylofosfonianach ustalono czynniki, które określają zakres występowania badanego przegrupowania:

- stwierdzono, że dla niepodstawionych w pozycji α do grupy sulfinylowej cyklopropylofosfonianów reakcja może być kontrolowana przez czynnik temperaturowy;

- istotny wpływ na przebieg reakcji cyklopropylofosfonianów z *i*-PrMgCl ma konfiguracja. Jeśli grupa fosforylowa i sulfinylowa znajdują się w relacji *cis*, to obserwowana jest 1,2-migracja grupy fosforylowej, natomiast dla izomerów *trans* otrzymuje się produkty desulfinylacji o zachowanej strukturze.

- przeprowadzono badania wpływu elektroujemności podstawnika (X: CO₂R > CN > SAr) α do grupy fosforylowej na przebieg desulfinylacji i stwierdzono, że w obecności nawet względnie słabej grupy sulfinylowej przegrupowania nie udaje się uniknąć.

Ponieważ metylowanie cyklopropylofosfonianów, przebiega w sposób w pełni selektywny, ale z utworzeniem diastereomerów w których grupa fosforylowa i sulfinylowa znajdują się po tej samej stronie pierścienia cyklopropanowego, desulfinylacja powoduje tworzenie przegrupowanych produktów. Uzyskane wyniki pozwoliły zaproponować wewnątrzcząsteczkowy uzgodniony mechanizm badanego przegrupowania co zostało dodatkowo potwierdzone obliczeniami DFT.

Asymetryczne cyklopropanowanie z użyciem dwóch grup sulfinylowych umożliwiło otrzymanie cyklopropyloвого bis sulfotlenku z całkowitą diastereoselekcją i bardzo wysoką enancjoselekcją. Wykazano, że jedna z grup sulfinylowych może być usunięta w sposób selektywny i udowodniono miejsce ataku odczynnika Grignarda.

Uzyskane rezultaty są przedmiotem publikacji „Highly asymmetric cyclopropanation with two sulfinyl auxiliaries” *Chirality* **27**, 816–819 (2015) i “Stereoselective cyclopropanation as a way to 1-aminocyclopropane-1-phosphonic acids. Problem with phosphoryl group migration” wysłanej do druku.

Grant NCN, nr umowy UMO-2014/13/N/ST5/03481

Synteza nowych chiralnych katalizatorów fosforoorganicznych zawierających ugrupowanie boranowe i chalcogenowe i ich zastosowanie w syntezie asymetrycznej.

Kierownik grantu mgr Lidia Madalińska, PRELUDIUM

Grant realizowany od 09.02.2015 do 08.02.2018

W roku 2015 badania koncentrowały się na dwóch tematach: Syntezie trójzębnych ligandów z ugrupowaniem fosfinosiarczkiowym i Syntezie trójzębnych ligandów z ugrupowaniem fosfinotlenkowym. W ramach pierwszego tematu badawczego podjęto próby znalezienia warunków reakcji doprowadzających do otrzymania na drodze enzymatycznego acetylowania prochiralnego siarczku bis(2-hydroksymetylofenylo)-fenylofosfiny i siarczku bis(2-hydroksymetylofenylo)metylofosfiny odpowiednich acetylowych pochodnych z wydajnościami i nadmiarami enancjomerycznymi bliskimi 100%, gdyż uzyskane do tej pory wyniki nie były satysfakcjonujące (maksymalne wydajności oscyływały w granicach 60 – 80% a nadmiary enancjomeryczne nie przekraczały 80%). Niestety wszelkie stosowane układy okazały się być gorsze niż pierwotnie znalezione. Mimo licznych prób mesylowania uzyskanych acetylowych pochodnych dalej nie udało się przeprowadzić tych związków w odpowiednie produkty, co umożliwiłoby łatwą drogę do syntezy odpowiednich ligandów.

W ramach drugiego tematu zsyntetyzowano tlenek bis(2-hydroksymetylofenylo)fenylofosfiny oraz przeprowadzono liczne próby jego enzymatycznej desymetryzacji uzyskując odpowiednią acetylową

pochodną w najlepszym wypadku z wydajnością 57%. Nadmiar enancjomeryczny z uwagi na trudności pomiarowe nie został oznaczony. Nie napotykając żadnych trudności przy zastosowaniu klasycznych odczynników, tj. bezwodnika mesyłowego i trietyloaminy przeprowadzono uzyskany tlenek (2-acetoksymetylofenylo)-(2'-hydroksymetylofenylo)-fenylofosfiny w odpowiednią mesyłową pochodną. Następnie w reakcji ze znanymi chiralnymi aminami uzyskano odpowiednie ligandy, które przetestowano w reakcji z dietylocynkiem i w reakcji Henry'ego. Niestety ligandy te nie wykazywały spodziewanej aktywności katalitycznej.

Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/B/ST5/05329

Procesy przepływowe w chemii chiralnych i achiralnych związków heteroorganicznych: aspekty syntetyczne i stereochemiczne.

Kierownik grantu prof. dr hab. Józef Drabowicz, OPUS

Grant realizowany od 11.08.2015 do 10.08.2018

Przeprowadzono wstępne eksperymenty sprawdzające możliwość otrzymania halogenków fosfinylowych w reakcjach tlenków drugorzędowych fosfin z tetrahalogenogenometanami lub trihalogenometanami prowadzonych bez udziału zasad organicznych. Opracowaną procedurę wykorzystano do syntezy enancjomerycznie czystych halogenków *t*-butylofenylofosfinylowych.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/N/ST5/00140

Opracowanie metod syntezy fluorowanych izoselenocyjanianowych analogów sulforafanu o spodziewanej zwiększonej aktywności przeciwnowotworowej.

Kierownik grantu Tomasz Cierpień, PRELUDIUM

Grant realizowany od 19.03.2013 do 18.03.2016

W roku 2015 badania skoncentrowane były na otrzymaniu fluorowanych, izoselenocyjanianowych analogów sulforafanu. Ich synteza polegała na poddaniu w pierwszym etapie N-(bromoalkilo)-ftalimidu reakcjom z dostępnymi handlowo fluorowanymi tiolami, a następnie kolejno usunięciu bloku ftalimidowego za pomocą hydrazyny, potraktowaniu otrzymanego sulfidu mrówczanem etylu, trifosgenem, sproszkowanym selenem. Otrzymano:

- sulfid 4-izoselenocyjanianobutylo-2',2',2'-trifluoroetylowy,
- sulfid 5-izoselenocyjanianopentylo-2',2',2'-trifluoroetylowy.

Otrzymane w/w związki, oraz sześć analogów otrzymanych w poprzednim okresie sprawozdawczym, próbowano poddać reakcjom utleniania do odpowiednich sulfotlenków z wykorzystaniem standardowych środków utleniających jak również z zastosowaniem peroksydaz, jednak próby te nie prowadziły do otrzymania żądanych produktów (następowały degradacje ugrupowania izoselenocyjanianowego, bądź reakcje utleniania nie zachodziły).

Z tego względu podjęto prace nad otrzymaniem analogów sulforafanu w postaci sulfotlenków w nieco odmienny sposób, mianowicie w pierwszym etapie, analogicznie, N-(bromoalkilo)-ftalimidy poddano reakcjom z dostępnymi handlowo fluorowanymi tiolami, a następnie kolejno utleniano otrzymane sulfidy do odpowiednich sulfotlenków, usuwano blok ftalimidowy za pomocą hydrazyny, następnie w warunkach katalizy dwufazowej otrzymywano odpowiednie izonitryle, które ostatecznie poddawano reakcjom ze sproszkowanym selenem. Otrzymano w ten sposób:

- sulfotlenek 4-izoselenocyjanianobutylo-4'-fluorobenzylowy,
- sulfotlenek 5-izoselenocyjanianopentylo-4'-fluorobenzylowy,
- sulfotlenek 4-izoselenocyjanianobutylo-3',5'-bis-(trifluorometylo)fenylowy,
- sulfotlenek 5-izoselenocyjanianopentylo-3',5'-bis-(trifluorometylo)fenylowy.

Wszystkie otrzymane analogi sulforafanu (12) przekazano do Narodowego Instytutu Leków w Warszawie, w celu zbadania ich właściwości przeciwnowotworowych.

Wynikiem przeprowadzonych prac, zarówno syntetycznych, jak również badań biologicznych, jest zgłoszenie patentowe.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/07/N/ST5/01985

Badania nowej reakcji elektrofilowej cyklizacji pochodnych diarylometanoli oraz diarylometanów po raz pierwszy wspomaganą ultradźwiękami o dużej mocy w układach wodnych.

Kierownik grantu mgr Emilia Kowalska PRELUDIUM

Grant realizowany od 15.07.2013 do 14.07.2016

Przedmiotem niniejszego projektu jest badanie nowo opracowanej wewnątrzcząsteczkowej reakcji elektrofilowego podstawienia aromatycznego pochodnych diarylometanoli oraz diarylometanów, przeprowadzanej w wodzie lub w układach wodno-rozpuszczalnikowych. Jest to pierwszy w literaturze przykład takiej reakcji cyklizacji prowadzącej do poliacenów zawierających 3 lub 4 skondensowane pierścienie aromatyczne.

W trakcie badań przeprowadzono optymalizację procesu cyklizacji o-acetalodiarylometanoeterów i o-formylo-diarylometanów (katalizator kwasowy; temperatura; moc ultradźwięków; rodzaj układu woda/rozpuszczalnik i wpływ na wydajność procesu).

Wykazano, że zastosowanie ultradźwięków w reakcji cyklizacji zarówno o-acetalo-diarylometanoli jak i o-formylo-diarylometanów daje możliwość wykonania jej w układach wodno-rozpuszczalnikowych, nawet gdy woda stanowi >80% objętości, jak również przynosi wielokrotne skrócenie czasu reakcji. W wyniku optymalizacji procesu, ustalono warunki prowadzenia reakcji elektrofilowej cyklizacji z udziałem ultradźwięków: 6.8 M HClO₄, acetonitril, 45-50°C, które pozwalają na ilościowe otrzymanie końcowych produktów - skondensowanych policyklicznych węglowodorów aromatycznych.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2011/03/B/ST5/02671

Stereozdefiniowane tiofosforanowe analogi DNA zawierające wtrącone jednostki nukleozydowe typu LNA - synteza i właściwości kompleksów utworzonych z matrycami DNA i RNA.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Piotr Guga,

Grant realizowany od 29.08.2012 do 28.08.2015

Przeprowadzono próby krystalizacji sześciu P-diastereoizomerycznie czystych związków z grupy oksatiafosforanów nukleozydów LNA używanych do syntezy P-stereozydefiniowanych oligomerów [PS]-(DNA/LNA). Wykryształizowano 3'-O-(2-tio-4,4-pentametyleno-1,3,2-oksatiafosforan)tymidylo-LNA, dla którego dane dyfrakcyjne zebrano i strukturę rozwiązano (CCDC nr 1061799) w laboratorium prof. Grzegorza Bujacza (Politechnika Łódzka, Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności, Instytut Biochemii Technicznej).

Dla dupleksów utworzonych przez zsyntezowane w 2014 r oligonukleotydy [R_P-PS]- i [S_P-PS]-d(GACATCACTAG) oraz serię ich P-stereozydefiniowanych analogów z wtrąconymi jednostkami LNA (2 x dA_L, 2 x dC_L, 3 x dC_L, 2 x dG_L, 2 x T_L) z matrycami DNA oraz RNA zarejestrowano widma ORD/CD. Przyniosły one dane konformacyjne spójne ze wcześniejszymi obserwacjami, że wartości T_m dla odpowiednich par [All-R_P-PS]- i [All-S_P-PS]-(DNA/LNA) zależą głównie od nukleozydu LNA, a w znacznie mniejszym stopniu od konfiguracji absolutnej atomów fosforu. Można wnioskować, że chociaż trwałość termodynamiczne dupleksów utworzonych przez [R_P-PS]- i [S_P-PS]-d(GACATCACTAG) zależy od stereochemii atomów fosforu, to jednostki LNA wnoszą wysokoenergetyczne zmiany, które czynią te początkowe różnice mało znaczącymi. Wyniki opublikowano w pracy „*Thermal stability and conformation of antiparallel duplexes formed by P-stereodefined phosphorothioate DNA/LNA chimeric oligomers with DNA and RNA matrices.*” (2015) Org. Biomol. Chem. 39, 10032-40 (IF2014 = 3.487).

Zsyntezowano niepalindromowe, P-stereozydefiniowane oligonukleotydy [All-R_P-PS]-(DNA/LNA) o sekwencjach homopurynowych (cztery 12-mery) i matryce DNA i (2'-OMe)-RNA (antyrownoległe WC₋ i równoległe H₋). Pomiar temperatur mięknięcia wykonane w buforach o pH 7,2 wykazały jednak, że H₋DNA nie asocjuje do [R_P-PS]-(DNA/LNA) z utworzeniem dupleksu równoległego H₋DNA/[R_P-PS]-(DNA/LNA), a powstają jedynie nie w pełni komplementarne dupleksy antyrownoległe. H₋DNA nie asocjuje również do systemów [R_P-PS]-(DNA/LNA)/WC₋RNA, ani tym bardziej do systemów [R_P-PS]-(DNA/LNA)/WC₋DNA. Również WC₋DNA nie asocjuje do systemów H₋RNA/[R_P-PS]-(DNA/LNA). Następną serią pomiarów wykonana została w buforze o pH 5,4, w którym cytozyny w jednoniciowym DNA ulegają uprotonowaniu w pozycji N3, co sprzyja oddziaływaniom Hoogsteena. Nieoczekiwany efekt wystąpił dla H₋DNA/G_L4 (G_L4 to [All-R_P-PS]-d(GG_LAG_LAAAG_LAG_LAG)) gdzie po raz pierwszy w naszych badaniach nad kompleksami równoległymi krzywa mięknięcia miała charakter dwufazowy. Może to oznaczać, że pewna frakcja H₋DNA zafunkcjonowała jako matryca WC i powstał trypleks H₋DNA/G_L4R/H₋DNA będący w równowadze

z dupleksem. W miarę ogrzewania jedna z nici DNA oddysocjowała w niższej temperaturze, a druga w wyższej. Za taką interpretacją przemawia fakt, że po dodaniu WC₋DNA obserwowana T_m wzrosła o kolejne 10 °C. Te obserwacje są ciekawe i obiecujące, bo w literaturze nie są znane dupleksy i trypleksy równoległe zawierające niemodyfikowane krótkie oligomery DNA. Hipoteza ta wymaga dalszych doświadczeń.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2011/03/B/ST5/02669

Badania desulfuracji 2-tiourydyn w kontekście uszkodzeń tRNA w warunkach stresu oksydacyjnego.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot,

Grant realizowany od 05.09.2012 do 04.09.2015

Opracowano metodę izolacji drożdżowych i bakteryjnych tRNA z komórek, które w trakcie hodowli poddano działaniu nadtlenu wodoru w celu wywołania wewnątrz komórkowego stresu oksydacyjnego. Właściwe tRNA izolowano z całkowitego komórkowego RNA za pomocą specyficznych sond oligonukleotydowych znakowanych biotyną, zawieszonych na żelu agarozowym. Obecność właściwego tRNA w wyizolowanym materiale potwierdzono analizą Northern blot, poprzez hybrydyzację ze specyficzną sondą wyznakowaną

izotopem fosforu ^{32}P . Wyizolowany tRNA posłużył jako materiał wyjściowy do analizy metodą spektrometrii mas, jako substrat do reakcji odwrotnej transkrypcji oraz do innych analiz mających na celu detekcję modyfikowanych nukleozydów w pętli antykodonu tRNA. Opracowano metodę analizy obecności modyfikowanych (zdesulfurowanych) nukleozydów w syntetycznym modelowym fragmencie tRNA lub w natywnym tRNA, wyizolowanym z komórek drożdży lub bakterii za pomocą odwrotnej transkrypcji oraz detekcję obecności siarki w badanym kwasie nukleinowym metodą elektroforezy w żelu poliakrylamidowym zawierającym związek rtęci. Wykazano przydatność obu tych metod do wykrywania produktów procesu oksydatywnej desulfuracji 2-tiourydyn. Za pomocą zaawansowanych metod spektrometrii mas (3Q MRM) stwierdzono obecność produktów desulfuracji mcm5S2U-tRNAGlu do mcm5H2U-tRNA^{Glu} i mcm5U-tRNA^{Glu} zachodzącej wewnątrz komórek drożdży poddanych działaniu H_2O_2 w warunkach naśladujących stres oksydacyjny. Wykazano, że oligonukleotydy zawierające zasadę 4-pirymidynonu są podatne na hydrolizę wiązania glikozydowego i depirymidynację, z wytworzeniem tzw. abasic-RNA.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2012/05/B/NZ1/01661

Rozwiązanie struktury krystalicznej deoksyrybozumu 10-23 i wyjaśnienie mechanizmu jego działania.

Kierownik grantu: dr Rafał Dolot

Grant realizowany od 01.03.2013 do 29.02.2016

Kontynuowano próby krystalizacji DNAzemu jak i jego analogów i koniugatów z wybranymi aptamerami. Dla wszystkich badanych obiektów przeprowadzono próby krystalizacji w warunkach handlowo dostępnych kombinacji buforów (*screens*). W sumie przebadano krystalizację DNAzemu w około 600 unikalnych warunkach. Wobec wcześniejszych niepowodzeń w uzyskaniu kryształów, przeprowadzono próby krystalizacji enzymu DNA z dodatkiem substancji modyfikujących warunki krystalizacji, m.in. TMAO, detergentów, czy związków o charakterze cieczy jonowych. Podjęto próby ko-krystalizacji DNAzemu z białkami oddziałyującymi z DNA, lub z białkami dla których wyselekcjonowano ich aptamer. W niektórych z zastosowanych warunków zaobserwowano wzrost mikrokryształów. Warunki krystalizacji zostaną zoptymalizowane w celu uzyskania kryształów o parametrach odpowiednich do przeprowadzenia pomiarów dyfrakcyjnych.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2012/05/B/ST5/00364

Barwienie membran komórkowych za pomocą oligoelektrolitów fenylenowinylenowych.

Kierownik grantu: dr hab. Arkadiusz Chworoś

Grant realizowany od 22.03.2013 do 21.03.2016

Kontynuowano badania pochodnych fenylenowinylenowych pod względem ich zastosowania jako barwników membran komórkowych. Zsyntetyzowano serię pochodnych fenylenowinylenowych i styrylostilbenowych oraz określono ich cytotoksyczność wobec 7 linii komórkowych (HeLa - raka szyjki macicy, K562 - przewlekłej białaczki szpikowej, 293T - zarodkowe komórki nerek, HUVEC - śródbłonna żyły pępowinowej, ludzkich i mysich fibroblastów oraz MDM - unieśmiertelnione komórki mezotelium otrzewnej). Wykazano, iż pochodne o długości 4-5 powtarzalnych jednostek styrylowych nie wykazują toksyczności w badanym zakresie stężeń (1-20 μM), natomiast pochodna distyrylobenzenu wykazuje toksyczność przy wyższych wartościach stężeń (10-20 μM). Przeprowadzono badania kolokalizacji wyselekcjonowanej pochodnej (distyrylostilben) za pomocą mikroskopii fluorescencyjnej i konfokalnej. Analiza mikroskopowa wykazała, że związek ten lokalizuje się w siateczce śródplazmatycznej, aparatach Golgiego i w zewnętrznej błonie mitochondrialnej natomiast nie lokalizuje się w jądrach komórkowych. Otrzymane wyniki stanowią podstawę przygotowywanej publikacji.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2012/05/B/NZ2/00574

Analiza udziału mikroRNA z egzosomów pochodzenia nowotworowego w rozwoju immunosupresji.

Kierownik grantu: prof. Markus Döchler

Grant realizowany od 12.03.2013 - 11.03.2016

The major aim of the project is to evaluate whether microRNAs (miRNAs) which are transported by tumor-derived exosomes contribute to cancer-induced immunosuppression. As miRNAs are potent regulators of cellular processes including the activation, maturation and differentiation of immune cells, it is reasonable to assume that at least in some cases cancer-derived exosomal miRNAs function to manipulate the immune system towards the induction of tolerance.

Down-regulation of target proteins by miRNAs transferred through exosomes

To demonstrate that miRNAs transported by exosomes are actually reducing the amount of their target proteins, cells were incubated in cell culture with various concentrations of exosomes. The expression of possible target proteins was analysed by Western blotting (NFAT5) and flow cytometry. To examine the influence of exosomal miRNAs on the differentiation and activation of antigen presenting cells, the monocytic THP-1 cell line was used. Differentiation into dendritic cells or macrophages was induced in vitro in the

presence or absence of exosomes. In addition to the expression analysis of characteristic surface markers, the production of three cytokines (IL-12, IL-6 and VEGF) was measured in the supernatant of cell cultures. A very significant downregulation of proteins crucial for antigen presentation and T cell activation mediated by cancer derived exosomes was found after preincubation of the exosomes for three days at 37 degree Celsius, and these results are a strong indication that the exosomal miRNAs are active in the observed effects. It was assumed that during the preincubation pre-miRNAs are processed into mature miRNAs resulting in the increased translational silencing of target genes. Quantitative analysis of selected miRNAs before and after preincubation did not reveal significant differences in the amounts of mature miRNAs. Finding no increase in mature miRNAs contradicts the research hypothesis, however, only a small percentage of the miRNAs found in exosomes were analysed. The influence of melanoma cell derived exosomes on the expression of target proteins on antigen presenting cells was further confirmed by transwell experiments (cut-off at 200µm).

The Uptake of Extracellular Vesicles is Affected by the Differentiation Status of Myeloid Cells

Does differentiation and maturation of myeloid cells change their capacity to take up cancer-derived extracellular vesicles (EV)? The efficiency of vesicle uptake by monocytes, macrophages and dendritic cells was measured. EV were labelled with two different dyes, carboxyfluoresceine diacetate succinimidyl-ester (CFSE), or a water soluble distyrylstilbene oligoelectrolyte, which preferentially intercalates into the cell membrane. THP-1 monocytes were differentiated into immature or mature dendritic cells, or macrophages. EV uptake was monitored by flow cytometry and immunofluorescence microscopy. The results show that macrophages and mature dendritic cells acquired stronger fluorescence transferred by EV than monocytes or immature dendritic cells indicating that the differentiation status influences the efficiency of EV uptake.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2011/03/B/ST5/02670

Stereozdefiniowane tiofosforanowe Glikolowe Kwasy Nukleinowe (GNA) - synteza i właściwości fizykochemiczne.

Kierownik grantu: dr Agnieszka Tomaszewska.

Grant realizowany od 29.08.2012 do 28.08.2016

Zsyntetyzowano, cztery monomery - 2-tio-4,4'-pentametyleno-1,3,2-oksatiafosfolanowe pochodne jednostek GNA (OTP-^{DMT}G_N) (Ade^{Bz}, Cyt^{Bz}, Ura, Thy), których strukturę potwierdzono za pomocą techniki FAB MS i ³¹PNMR. Dla uzyskanych związków opracowano metody rozdzielania na P-diastereoizomery stosując chromatografię HP-TLC i HPLC. Wykorzystując poszczególne izomery monomerów OTP-^{DMT}G_N otrzymano stereoizomeryczne związki typu (G_N)_{PS}T (związki scharakteryzowane za pomocą technik MALDI TOF MS i ³¹PNMR). Przeprowadzono korelację (metodami chemicznymi i z wykorzystaniem stereospecyficznych enzymów: Nukleazy P1 i Fosfodiesterazy z jadu węża) pomiędzy mobilnością chromatograficzną P-diastereoizomerów *fast* i *slow* OTP-^{DMT}G_N a konfiguracją absolutną na atomie fosforu i węgla w związkach (G_N)_{PS}T. Uzyskano przesłanki, że izomery (P-*fast*; C-_{„+”})G_N są prekursorami wiązań internukleotydowych z atomami fosforu o konfiguracji R_P, natomiast z izomerów (P-*fast*; C-_{„-”})G_N powstają wiązanie internukleotydowe z atomami fosforu o konfiguracji S_P. Badane związki (G_N)_{PS}T nie są substratami dla Nukleazy P1. Uzyskano tiofosforanowy analog oligonukleotydu GNA (8-mer) o mieszanej konfiguracji na atomie fosforu, który wyizolowano techniką RP-HPLC i scharakteryzowano za pomocą analizy MALDI TOF MS (Synteza wymagała wcześniejszej optymalizacji standardowej procedury otrzymywania tiofosforanowych oligonukleotydów metodą oksatiafosfolanową). Podjęto również próby krystalizacji poszczególnych izomerów OTP-^{DMT}G_N z zastosowaniem wielu podejść, w tym również sposobu, który przyniósł sukces w opisanym wyżej przypadku 3'-O-(2-tio-4,4-pentametyleno-1,3,2-oksatiafosfolan)tymidyno-LNA, ale wszystkie doświadczenia zakończyły się niepowodzeniem.

Grant NCN, PRELUDIUM, nr umowy: UMO-2012/05/N/NZ7/01174

Związki o potencjalnych właściwościach przeciwnowotworowych z grupy pochodnych benzo[b]furanów i dikarboksyimidów – badanie mechanizmu działania w komórkach ludzkich.

Kierownik grantu: dr Karolina Królewska

Grant realizowany od 28.02.2013 do 27.02.2015

W dwóch miesiącach roku sprawozdawczego skupiono się na przygotowaniu rozprawy doktorskiej (obrona odbyła się w marcu 2015) oraz przygotowaniu publikacji (dwie w trakcie ewaluacji). Opracowano raport końcowy, w którym stwierdzono, że najważniejszym osiągnięciem 2 lat pracy było wyselekcjonowanie, z puli 80 pochodnych benzo[b]furanów i dikarboksyimidów, 9 związków o silnych właściwościach cytotoksycznych w stosunku do wybranych komórek nowotworowych, przy czym niektóre związki wykazały wyższą toksyczność oraz selektywność w stosunku do komórek białaczkowych niż referencyjne cytostatyki, takie jak cytarabina, bortezomib, sorafenib, CPT-11 i doksorubicyna. Uzyskane wyniki stały się podstawą do

wystąpienia o uzyskanie finansowania dalszych, bardziej zaawansowanych badań komórkowych i w modelu zwierzęcym (uzyskano finansowanie w ramach konkursu NCN OPUS8).

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2013/09/B/ST5/03612

Transformacja 5'-O-monotiofosforanów nukleozydów do odpowiednich 5'-O-monofosforanów w warunkach komórkowych - możliwa droga metaboliczna tiofosforanowych leków i proleków.

Kierownik grantu: dr Agnieszka Krakowiak,

Grant realizowany od 13.02.2014 do 12.02.2017

Kontynuowano badania funkcjonalności receptora P2X7 w wybranych liniach komórkowych (komórki HeLa, THP1 - Acute Monocytic Leukemia, K562 - Chronic Myelogenous Leukemia, A375 - human melanoma). Przy użyciu cytometru przepływowego (wybrana metoda umożliwia uzyskanie wyników ilościowych) przeprowadzono ocenę wnikania jodku propidyny do komórek po aktywacji receptora (za pomocą ATP lub Bz-ATP). Stwierdzono, że funkcjonalne receptory P2X7 obecne są w liniach K562 i HeLa, i w nich można wprowadzać AMPS z zastosowaniem metody aktywacji receptorów P2X7. Sprawdzono zaplanowane do użycia metody badania stężenia H₂S w komórkach, czyli metodę elektrochemiczną z użyciem elektrody selektywnej wobec H₂S, oraz metodę fluorescencyjną z użyciem fluorogenicznego markera. W metodzie elektrochemicznej uzyskano niezadowalającą dokładność i powtarzalność odczytów. Uzyskano wstępne wyniki badania poziomu wydzielania się H₂S z użyciem fluorogenicznego substratu SF4, po wprowadzeniu 5'-O-tiofosforanu adenozyiny do komórek A549 i HeLa.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2013/11/B/ST5/01581

P-Stereozdefiniowane tiofosforanowe analogi DNA zawierające w obrębie heterozasad modyfikacje uniemożliwiające oddziaływania Watsona-Cricka - oddziaływania Hoogsteena z matrycami RNA i DNA.

Kierownik grantu: dr Anna Maciaszek,

Grant realizowany od 22.08.2014 do 21.08.2017

Wykonano syntezę N1-metylo-N2-iBu-2'-deoksyguanozyny (strukturę otrzymanego związku potwierdzono za pomocą MS FAB), który następnie przekształcono w pochodną 5'-O-DMT. Stosując metodę literaturową (M. Sekine, T. Satoh, A Convenient Method for the Synthesis of N²,N²-Dimethylguanosine by Reductive C-S Bond Cleavage with Tributyltin Hydride, *J. Org. Chem.* 1991,56, 1224-1227) dokonano przekształcenia 3',5'-diacetylo-2'-deoksyguanozyny w jej pochodną N2,N2-dimetylową, a strukturę wyizolowanego produktu potwierdzono metodami spektroskopowymi. Po usunięciu grup acetylowych i wprowadzeniu grupy DMT wykonano reakcję fosfitylacji DMT-N2,N2-dimetylo-2'-dG za pomocą 2-chloro-4,4-pentametyleno-1,3,2-oksatiafosfolanu w CH₂Cl₂ wobec diizopropylotetyloaminy. Analiza produktów reakcji za pomocą ³¹P NMR wykazała obecność zarówno sygnałów charakterystycznych dla pożądaných pochodnych oksatiafosfolanowych (δ ³¹P 104,59; 104,09 ppm), jak i produktu fosfitylacji zasady heterocyklicznej (δ ³¹P 98,32 ppm), co udowodniono po rozdzielaniu składników mieszaniny za pomocą HPLC i analizie frakcji technikami ³¹P NMR i MS FAB. Selektywną fosfitylację uzyskano po zastosowaniu pirydyny jako rozpuszczalnika. Powstały monomer został za pomocą HPLC (kolumna Phenomenex Luna 5 μ Silica 258x10 mm) rozdzielony na P-diastereoizomery, których czystość diastereoizomeryczną potwierdzono za pomocą ³¹P NMR. W celu wykonania korelacji pomiędzy mobilnością chromatograficzną (monomer *fast* i *slow*) a konfiguracją absolutną atomu fosforu w tworzonym wiązaniu internukleotydom, monomery *fast* i *slow* skondensowano z 3'-O-Ac-tymidyną wobec DBU. Otrzymane zablokowane dinukleotydy poddano deprotekcji, a po oczyszczeniu metodą HPLC zostały one scharakteryzowane metodą spektrometrii masowej.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2014/13/B/ST5/03979

Biosynteza seleno-modyfikowanych nukleozydów w pętli antykodonu transferowych kwasów rybonukleinowych. Ewaluacja enzymatycznej transformacji 2-tiourydyny do 2-selenourydyny, badania funkcji i struktury tRNA selenourydyno syntazy z *E. coli*.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot,

Grant realizowany od 01.04.2015 do 31.03.2018

Przeprowadzono badania nad pozyskaniem rekombinowanej syntazy 2-selenourydyno tRNA. W tym celu wyizolowano gen kodujący białko SelU z całkowitego RNA z bakterii *E. coli* i wklonowano do plazmidu klonującego pUC19, a następnie wprowadzono gen selU do czterech plazmidów ekspresyjnych: (pHAT2, pETM20, pETM30 i pET28c). Po zoptymalizowaniu procesu przeprowadzono nadekspresję białka SelU w bakteriach *E. coli*, produkt oczyszczono na złożu powinowactwa. Uzyskano 1,45 mg białka z 1 l hodowli. Scharakteryzowano wstępnie otrzymany preparat białkowy (identyfikacja metodą Western blot), potwierdzono sekwencję aminokwasową metodą sekwencjonowania i analizy LC-MS, przeprowadzono analizę CD w celu wstępnej oceny udziału α - i β -struktur w globalnej strukturze białka. Zbadano aktywność enzymatyczną syntazy w reakcji geranylowania S2U-RNA, zidentyfikowano produkty reakcji za pomocą

spektrometrii mas metodą MALDI TOF. Zaobserwowano zależność aktywności SelU od obecności jonów Mg^{2+} w środowisku reakcji. Wykazano, że białko SelU wiąże wewnątrzkomórkowy bakteryjny tRNA^{Lys} i tRNA^{Glu}, który zawiera w pozycji wahadłowej pochodne S2U, natomiast nie wiąże bakteryjnego tRNA^{Gln}, który nie zawiera S2U. Przeprowadzono próby krystalizacji białka SelU z wykorzystaniem dostępnych odczynników z zestawów krystalizacyjnych. Przetestowano w sumie 480 warunków, zaobserwowano wzrost mikrokryształów w jedenastu wariantach warunków, a dwa spośród nich zostaną wykorzystane w toku dalszych prac dla optymalizacji procesu krystalizacji.

Przeprowadzono wstępne eksperymenty mające na celu izolację i klonowanie genu selD, kodującego syntetazę selenofosforanu. Ponadto, opracowano postsyntetyczną modyfikację S2U-RNA (17-meru) do pochodnej S-geranylowej. Takie same produkty otrzymano również na drodze enzymatycznej (geranylowanie S2U-RNA za pomocą difosforanu geranylu w obecności SelU) oraz poprzez geranylowanie chemiczne w pełni odblokowanego RNA, ale wydajności tych dwóch ostatnich procesów były niższe niż modyfikacji postsyntetycznej.

Grant NCN, OPUS, nr umowy: UMO-2014/15/B/NZ7/00966

Nowe leki przeciwbiałczkowe - zaawansowane badania przedkliniczne.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot,

Grant realizowany od 22.09.2015 do 21.09.2018

W ramach projektu partner WUM zsyntetyzował i przekazał do badań biologicznych 14 nowych pochodnych z grupy benzo[b]furanów i dikarboksyimidów, wyselekcjonowanych jako najbardziej aktywne związki w badaniach wstępnych. W ZChB przeprowadzono badania skringowe aktywności cytotoksycznej tych związków w stosunku do komórek nowotworowych raka szyjki macicy HeLa i przewlekłej białczki szpikowej K562. Określono przeżywalność komórek w obecności badanych związków (w stężeniu 100 μ M) po 48 h i 72 h inkubacji. Dla związków wykazujących znaczną cytotoksyczność (poniżej 50% przeżywalności) wykonano dalsze badania cytotoksyczności w pełnym zakresie stężeń w celu wyznaczenia parametru IC₅₀. Podjęto próby otrzymania biotynylowanych pochodnych związków wyselekcjonowanych w badaniach wstępnych jako najbardziej cytotoksycznych w stosunku do komórek białczkowych i nietoksycznych w stosunku do komórek prawidłowych.

Grant NCN, SYMFONIA, nr umowy: UMO-2015/16/W/ST5/00413

Oligopodalne kompozyty kwasów nukleinowych i klastrów boru - nowy materiał dla bionanotechnologii.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Barbara Nawrot,

Grant realizowany od 16.11.2015 do 15.11.2019

W 2015 roku realizacja projektu objęła okres sześciu tygodni. Zaprojektowano modelowe oligonukleotydy DNA, które będą postsyntetycznie znakowane klastrami boru. Zdecydowano, że w pierwszym etapie metodą amidofosforynową na fazie stałej zsyntetyzowane zostaną krótkie oligomery (pentamery), zawierające wszystkie cztery jednostki kanoniczne, w tym jednostkę tymidyny zawierającą resztę alkinową w pozycji C5 nukleozasady lub 2'-reszty cukrowej. Wytworzone związki zostaną poddane reakcji *click* z wybranymi azydokarboranami. Reakcja ta wymaga optymalizacji warunków reakcji cykloaddycji i oczyszczania otrzymanego produktu.

Grant NCN, nr umowy: UMO-2014/15/B/ST5/05321

Hybrydowa metoda modelowania i optymalizacji procesów polimeryzacji.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Ryszard Szymański, OPUS

Grant realizowany od 07.08.2015 do 06.08.2018

W 2015 roku przeprowadzono wstępne badania zgodnie z harmonogramem realizacji grantu. Badając kopolimeryzację odwracalną metodami modelowania numerycznego jednego typu: stochastycznego (Monte Carlo) i oddzielnie deterministycznego (całkowanie numeryczne kinetycznych równań różniczkowych) przygotowano podstawy do przygotowania na dalszym etapie realizacji grantu metody hybrydowej modelowania komputerowego, łączącej zalety obu wymienionych metod. Wyniki badań kopolimeryzacji odwracalnej posłużyły do przygotowania i przesłania do Macromol. Theory Simul. publikacji pt. „Evolution of Chain Microstructure and Kinetics of Reaching Equilibrium in Living Reversible Copolymerization” (przyjęta do druku).

Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01618

Mikrocząstki stereokompleksów polilaktydu zawierające jony metali i ich wykorzystanie do uwalniania substancji czynnych farmakologicznie.

Kierownik grantu dr hab. Melania Bednarek, OPUS**Grant realizowany od 22.08.2014 - 21.08.2017**

W roku 2015 realizowano równocześnie kilka zadań przewidzianych w Grancie. Przeprowadzono szereg syntez polilaktydów PLLA i PDLA o różnych ciężarach cząsteczkowych zawierających jedną grupę –COOH na końcu łańcucha co zrealizowano w wyniku polimeryzacji kationowej laktydu inicjowanej kwasem glikolowym lub kwasem bis(hydroksymetylo)propionowym a także otrzymano PLA z dwoma grupami –OH w wyniku polimeryzacji inicjowanej glikolem etylenowym. Polimeryzacje prowadzono zarówno w bloku w temperaturze 105 °C, czyli powyżej temp. topnienia laktydu, bądź też w dichlorometanie w temp. pokojowej. Otrzymane polimery charakteryzowano stosując takie metody jak ¹H NMR, GPC, MALDI TOF. Otrzymane PLLA i PDLA posiadające grupy-OH poddano estryfikacji bezwodnikiem bursztynowym (w obecności DABCO) w celu wprowadzenia dodatkowych grup –COOH. Efektywność funkcjonalizacji oceniano metodami ¹H NMR i MALDI TOF.

Niezależnie otrzymano polimery zawierające kilka grup –COOH w wyniku sekwencyjnej kopolimeryzacji laktydu z eterem glicydyloowo-allilowym co umożliwiło wprowadzenie wiązań alkenowych na końcu łańcucha, które w następnym etapie zostały wykorzystane do addycji tioli zawierających grupy –COOH (merkaptan bursztynowy i propionowy) z wykorzystaniem reakcji typu „click”- tzw. „addycja „thiol-ene”. PLLA i PDLA z jedną grupą –COOH zostały wykorzystane do badań procesu stereokompleksacji w obecności różnych tlenków metali takich jak CaO, ZnO, MgO, Fe₂O₃. W efekcie otrzymano sferyczne mikrocząstki PLA (1-5 μm) o różnym stopniu regularności. Określono wpływ rodzaju tlenku, rodzaju rozpuszczalnika oraz *M_n* polimeru na morfologię stereokompleksów, którą badano metodą SEM. Otrzymano również stereokompleksy PLLA i PDLA zawierające więcej niż jedna grupa –COOH oraz różniące się położeniem grup –COOH w łańcuchu a następnie analizowano ich morfologię.

Rozpoczęto badania enkapsulacji witamin: D₃, A, B₆, B₉ w trakcie procesu stereokompleksacji przeprowadzonej w obecności CaO w kilku rozpuszczalnikach (THF, dichloropropan, DMF, dioksan). Zbadano rozpuszczalności witamin, wybrano rozpuszczalniki najbardziej odpowiednie dla określonych witamin, stwierdzono ograniczoną efektywność enkapsulacji.

Rozpoczęto badanie podatności mikrocząstek stereokompleksów PLA na hydrolizę umieszczając próbki stereokompleksu oraz wyjściowego PLLA (dla porównania) w buforze fosforowym w temp. pok. na określony czas, po którym (w kolejnym roku sprawozdawczym) zostaną zbadane takie parametry jak ubytek masy, zmiana *M_n* zmiana morfologii mikrocząstek.

Grant NCN, nr umowy UMO-013/09/B/ST5/03616**Supramolekularne struktury liniowych i gwiazdzistych polilaktydów oraz ich stereokompleksy poprzez oddziaływania funkcjonalizowanych grup końcowych ("lepkich końców"). Synteza i relacje między strukturą i właściwościami.****Kierownik grantu prof. Tadeusz Biela, OPUS****Grant realizowany od 17.02.2014 do 16.02.2017**

Zsyntetyzowano zestaw polilaktydów o strukturze gwiazdzistej o różnej liczbie ramion: 4, 6, 8 zakończonych grupami hydroksylowych a następnie zmodyfikowano te grupy do grup karboksylowych. Otrzymane polimery zostały scharakteryzowane i zbadano ich podstawowe właściwości. Polilaktydy o strukturze gwiazdzistej otrzymano w wyniku polimeryzacji L,L-laktydu inicjowanej związkami wielohydroksylowymi: di(trimetylolopropanem) (4-grupy -OH), dipentaerytrytem (6-grup –OH), tripentaerytrytem (8-grup –OH). Każdy eksperyment przeprowadzono w bloku w temperaturze 130°C pod zmniejszonym ciśnieniem przez 24h. Jako katalizatora użyto oktanianu cyny (Sn(Oct)₂). Otrzymane polimery posiadały liczbową średnią masę molową *M_n* : 4-OH 7 000, 6-OH 10 000, 8-OH 16 000. Wydzielone materiały scharakteryzowano przy użyciu technik: chromatografii SEC, spektroskopii ¹H i ¹³C NMR, FT-IR, wiskozymetrii. Oczyszczone polilaktydy gwiazdziste użyto w reakcji modyfikacji hydroksylowych grup końcowych na grupy karboksylowe. Reakcje modyfikacji grup hydroksylowych prowadzono w CHCl₃. Do roztworu polimeru dodano katalizator (DABCO w CHCl₃), a następnie roztwór bezwodnika bursztynowego w CHCl₃. Reakcje prowadzono w temperaturze pokojowej przez 24h w atmosferze argonu. Mieszaninę reakcyjną wytrącono do zimnego metanolu. Produkt wytrącił się w postaci białego proszku, który odfiltrowano i suszono pod zmniejszonym ciśnieniem. Na podstawie analizy widm ¹H NMR szacunkowa wydajność reakcji modyfikacji wynosi około 95%.

Otrzymano polilaktydy gwiazdziste o różnej liczbie ramion. Jednocześnie zachowano dużą kontrolę nad średnią masą molową polimerów tak aby długości pojedynczych ramion we wszystkich polimerach były podobne i wynosiły około 2 000. Opracowano wydajną metodę modyfikacji hydroksylowych grup końcowych w polimerach gwiazdzistych.

Grant NCN, nr umowy UMO-2013/09/B/ST5/03619**Gwiazdziste polilaktydy - synteza i porównanie właściwości z polimerami liniowymi.****Kierownik grantu dr hab. Grzegorz Łapienis, OPUS**

Grant realizowany od 17.02.2014 do 16.02.2017

Celem badań jest porównanie właściwości mechanicznych i reologicznych gwiaździstych poli(L-laktydów) (PLLA) z ich liniowymi analogami o porównywalnych masach molowych. W okresie sprawozdawczym przeprowadzono syntezę szeregu polimerów gwiaździstych o 6 ramionach z PLLA. Polimery o różnych długościach ramion otrzymano w polimeryzacji w masie w temp. 130°C i 160°C; inicjatorem był dipentaerytryt a katalizatorem oktanian cyny. Charakterystykę polimerów przeprowadzono wykorzystując metody: NMR, SEC, DSC.

Otrzymane poli(L-laktydy) zawierają na końcach łańcuchów grupy hydroksylowe, które powodują termiczną degradację polimeru w podwyższonych temperaturach (180 °C) stosowanych podczas badań właściwości reologicznych. Dodatek odpowiednich stabilizatorów zapobiega termicznej degradacji polimerów. Handlowe polilaktydy również zawierają stabilizatory termiczne i dezaktywatory katalizatora. Kilkakrotne próby mieszania w brabenderze, otrzymanych PLLA ze stabilizatorami, nie dały pozytywnych wyników, ponieważ nie udało się w odpowiednio krótkim czasie doprowadzić do uzyskania jednorodnej mieszaniny i masy molowe polimerów znacznie malały już podczas procesu mieszania. Jediną metodą, która zapewniała uzyskanie jednorodnej mieszaniny było dodanie stabilizatorów do roztworu polimeru w chlorku metylenu. Po zatężeniu roztworu i wysuszeniu polimeru w próżni w temp. 85 °C, otrzymywano w ten sposób stabilizowane PLLA, które wykazywały dużą stabilność termiczną i niewielką zmianę mas molowych w temp. 200 °C, nawet w ciągu 1 godz.

Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/B/ST5/02672

Badania procesów wytwarzania i strukturyzowania nowych materiałów hybrydowych.

Kierownik grantu: dr hab. Anna Kowalewska, OPUS

Grant realizowany od 29.08.2012 do 28.08.2015

Wyniki przeprowadzonych badań dostarczyły informacji dotyczących metod syntezy i specyficznych właściwości jak również możliwości wykorzystania nowych materiałów hybrydowych zbudowanych na liniowych drabinkowych poli(silsekwioxanach) (LPSQ) zawierających struktury złożone z wiązań krzem-tlen. W czasie prac prowadzonych nad projektem opracowano efektywną metodę wytwarzania i funkcjonalizowania liniowych drabinkowych LPSQ, posiadających ciekawe właściwości fizykochemiczne i zdolnych do tworzenia cienkich warstw polimerowych dzięki obecności grup bocznych zdolnych do oddziaływań supramolekularnych. Za pomocą spektrometrii MALDI ToF zbadano proces tworzenia drabinkowych silsekwioxanów i zaproponowano mechanizm tej reakcji (analiza przebiegu polikondensacji i wykazanie redystrybucji wiązań siloksanowych).

Poznano nie tylko mechanizmy wytwarzania polimerów, ale też trwałość wytworzonych z nich nano- i mikrostrukturyzowanych powierzchni o zadanych właściwościach. Opracowano metodę wytwarzania cienkich warstw polimerowych na mice natywnej oraz zmodyfikowanej za pomocą małowcząsteczkowych związków organicznych. Wykazano zależność morfologii naniesionej warstwy polimerowej od struktury polimeru i rodzaju oddziaływań z podłożem (wiązania jonowe lub wodorowe) oraz odporność naniesionych warstw na działanie wybranych czynników fizyko-chemicznych. Wyjaśniono mechanizm specyficznej zmiany energii powierzchniowej warstwy LPSQ-COOH w wyniku ogrzewania i odtworzenia pierwotnej struktury warstwy w wyniku działania pary wodnej, które to zjawisko umożliwia zmianę hydrofilowości naniesionych warstw i wzorów przy zachowaniu specyfiki chemicznej powierzchni. Wyniki otrzymanych badań pozwalają też na lepsze zrozumienie zjawiska zwilżalności powierzchni materiałów polimerowych. Wykorzystując specyficzność budowy chemicznej oraz strukturalnej badanych materiałów i ich oddziaływań z podłożem, przygotowano unikalne nanostrukturyzowane (chemicznie i topograficznie) powierzchnie syntetyczne z LPSQ naniesionym w postaci tuszu polimerowego o bardzo dobrych właściwościach odwzorowujących. Dzięki uzyskanym wynikom badań można będzie rozwinąć metody wytwarzania nano- i mikrostrukturyzowanych (również w sposób periodyczny) sztucznych podłoży o specyficznych właściwościach fizyko-chemicznych. Ponadto, otrzymano liniowe oligo(fenylosilsekwioxany) i przygotowano z nich w systemach beztemplatowych materiały o strukturze makroporowatej dzięki wykorzystaniu spontanicznej organizacji i oddziaływań π - π między grupami fenyłowymi w sztywnych łańcuchach oligomerów. Oligo(fenylosilsekwioxany) wykorzystano również do modyfikacji nanocząstek krzemionki otrzymując interesujące materiały makro-mezoporowate.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/05/B/ST5/00366

Bimetaliczne nanocząstki metali szlachetnych o kontrolowanym składzie i strukturze.

Kierownik grantu: dr hab. Paweł Uznański, OPUS

Grant realizowany od 04.03.2013 do 03.03.2016

Zbadano mechanizmy redukcji i stabilizacji nanocząstek srebra i palladu syntetyzowanych w obecności pierwszorzędowych amin. Otrzymano koloidy stabilizowane odpowiednimi karboksylanami o wybranej długości łańcucha alifatycznego (C1, C12) i aminą. Przeprowadzono analizy uzyskanych NCz metodami

spektroskopii NMR ^1H i ^{13}C , FTIR, UV-Vis, mikroskopii elektronowej SEM z analizą pierwiastkową EDX oraz rentgenografii XRD. Uzyskane dane z analiz pokazały, że nowe metody syntezy prowadzona w temp. 80-150 °C pozwalają na uzyskanie nanostruktur o zaprogramowanym składzie i rozmiarach rzędu 6-10 nm. Kontynuowano badania przewodnictwa elektrycznego otrzymanych nanostruktur w obecności mieszanin gazowych wodór/azot o różnym składzie. Otrzymane wyniki wskazują, że przewodnictwo układów z palladem jest czułe na obecność cząsteczkowego wodoru w szerokim zakresie prądów od nano- do mikroamperów.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/07/B/ST5/02603

Oligosilseskwioxanowe nano-nośniki leków.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Włodzimierz Stańczyk, OPUS

Grant realizowany od 13.06.2013 do 12.06.2016

W roku 2015 otrzymano nano-kompozyty silseskwioxan-antracykliny (doksorubicyna i daunorubicyna) wykorzystując trzy drogi syntezy. Wykorzystano reakcję „click” silseskwioxanu z ugrupowaniami azydkowymi i pochodną amidową doksorybicyny, uzyskaną w reakcji tej ostatniej z kwasem 5-heksynowym. Otrzymano silseskwioxan (POSS) z terminalnym ugrupowaniem aldehydowym w sekwencji reakcji winylowego POSS kolejno z α,ω -hydroksytiolem i benzaldehydem podstawionym w pozycji *para* ugrupowaniem karboksylowym. Tak zmodyfikowany POSS poddano reakcji z doksorubicyną uzyskując kowalencyjne połączenie iminowe. Perwinylowy POSS przereagowano z kwasem tioundekanowym a następnie połączono go z chlorowodorkiem doksorubicyny uzyskując cztery nano-kompozyty wiążące od 1 do czterech cząsteczek antybiotyku. Analogiczne cztery układy z różną liczbą cząstek antybiotyku zsyntezowano wiążąc daunorubicynę zmodyfikowany bezwodnikiem bursztynowym z chlorowodorkiem daunorubicyny. Nano-kompozyty zidentyfikowano w MALDI TOF a przebieg reakcji sprzęgania określano wykorzystując spektroskopię NMR. Częściowe rezultaty zostały przedstawione w czasopiśmie *Materials*.

Grant NCN, nr umowy UMO-2013/11/B/ST5/01615

Synteza mikrosfer krzemowo-węgliko-tlenkowych (SiCO) z polisiloksanów i ich zastosowania do otrzymywania ceramicznych kompozytów i ceramiczno-polimerowych materiałów hybrydowych.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Stanisław Słomkowski

Grant realizowany od 29.08.2014 do 28.08.2017

Celem badań jest opracowanie metody syntezy mikrosfer krzemowo-węgliko-tlenkowych SiCO w wyniku pirolizy preceramicznych mikrosfer polisiloksanowych. Celem jest również dostarczenie wiedzy o procesach ceramizacji mikrosfer polisiloksanowych oraz o budowie i własnościach mikrosfer SiCO, a także zbadanie możliwości użycia mikrosfer SiCO do syntez materiałów hybrydowych, zwłaszcza jako wypełniaczy ułatwiających ceramizację polimerów preceramicznych. W roku sprawozdawczym wykonano szerokie badania syntez preceramicznych polisiloksanów o różnej strukturze i ich ceramizacji w różnych temperaturach, do 1400°C. Modyfikację mikrosfer prowadzono trzema metodami: a) podstawienia grup organicznych w łańcuchu polimeru prekursorowego, b) użycia różnych środków sieciujących, c) zmianę parametrów syntezy. Zbadano wpływ tych modyfikacji na przebieg ceramizacji w różnych temperaturach oraz na budowę chemiczną i morfologiczną mikrosfer SiCO. Badania prowadzono metodami termografii, mikroskopii SEM, densytometrii, Spektroskopii ^{29}Si MAS NMR, ^{13}C MAS NMR, FTIR i Ramana, XRD i analizy elementarnej. Wykazano, że zmodyfikowane mikrosfery preceramiczne zachowują sferyczny kształt w wysokich temperaturach, nawet do 1400°C i nie zawierają defektów. Odpowiednio wybrane modyfikacje umożliwiają otrzymanie mikrosfer zawierających zwiększone zawartości wolnego węgla aromatycznego sp^2 , jak również zwiększonego udziału węgla sp^3 w sieci SiCO.

Grant NCN, nr umowy UMO-2014/13/B/ST5/04376

Układy elipsoidalnych hydrofilowych cząstek polimerowych na podłożach o kontrolowanych właściwościach.

Kierownik grantu: dr hab. Teresa Basińska

Grant realizowany od 09.02.2015 do 08.02.2018

Głównym celem prac planowanych do realizacji w ramach projektu jest zbadanie sekwencji procesów prowadzących do otrzymania dwu- i trójwymiarowych układów elipsoidalnych cząstek polimerowych, o różnych stosunkach średnicy dłuższej (nie większej niż kilka mikrometrów) do krótszej, z powłoką o kontrolowanej hydrofilowości (od hydrofobowych do hydrofilowych), na podłożach o kontrolowanych właściwościach, tj. o kontrolowanej hydrofilowości, stężeniu grup chemicznych, takich jak: aminowych, hydroksylowych, epoksydowych. W celu realizacji projektu, zasadniczą część prac stanowiło opracowanie metody otrzymywania cząstek elipsoidalnych ze zsyntetyzowanych cząstek sferycznych o budowie jądro-powłoka zawierających segmenty hydrofilowego poliglicydolu w warstwie powierzchniowej. Otrzymano cząstki elipsoidalne o różnych współczynnikach kształtu w zakresie 1,5-3,5 z cząstek sferycznych

polistyrenowych oraz polistyrenowych zawierających w powłoce poliglicydol. Opracowano metodę uzyskiwania powierzchni krzemu z wbudowanymi grupami aminowymi i epoksydowymi. Modyfikowane powierzchnie krzemu scharakteryzowano za pomocą FTIR i spektroskopii fotoelektronowej promieniowania X (XPS). Przeprowadzono cykl badań adsorpcji cząstek elipsoidalnych na modyfikowanych powierzchniach krzemu. W poszczególnych cyklach doświadczeń zmieniano stężenie wyjściowych cząstek. Oznaczono gęstość powierzchniową cząstek na powierzchniach krzemu z różnymi grupami aktywnymi oraz oznaczono parametry położenia cząstek.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/07/N/ST5/01980

Sfunkcjonalizowane mikrosfery polisiloksanowe jako nośniki katalizatorów.

Kierownik grantu: dr Piotr Pospiech, PRELUDIUM

Grant realizowany od 15.08.2013 do 14.08.2016

Celem badań jest opracowanie syntez nowych katalizatorów heterogenicznych w oparciu o polisiloksanowe mikrosfery, które ostatnio zostały otrzymane w naszym zakładzie. Otrzymano mikrosfery zawierające reaktywne grupy SiOH, które następnie modyfikowano przez wprowadzanie, na drodze reakcji kondensacji, grup funkcyjnych, mogących koordynować metale przejściowe. W tym celu wykorzystano chloro- i alkoksylany, które zawierały odpowiednie ligandy azotowe (aminowe, aminoetyloaminowe, imidazolowe). Przeprowadzono również syntezę alkoksylanów z grupami fosfinowymi, azydkowymi i triazolowymi. Następnie przeprowadzono modyfikacje mikrosfer, na które po dokładnym scharakteryzowaniu (techniki NMR, IR, SEM) nanoszono metale przejściowe (pallad, platyna). Tak otrzymane heterogenizowane katalizatory analizowano i testowano w reakcjach modelowych (reakcja Hecka, hydrosililowanie, uwodornienie).

Przeprowadzono również próby wprowadzenia kompleksów metali przejściowych do matrycy siloksanowej podczas procesu tworzenia mikrosfer. Otrzymano porowate mikrosfery zawierające nanocząstki metalu, które wykazują wysoką aktywność katalityczną.

Otrzymano również mikrosfery zawierające nanocząstki tlenku żelaza. Uzyskano w ten sposób mikrosfery wykazujące właściwości magnetyczne, które po dalszej modyfikacji zostaną zastosowane jako nośniki katalizatorów.

Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/D/ST8/04156

Faza amorficzna polimerów częściowo krystalicznych - struktura, stan fizyczny i ich rola we właściwościach mechanicznych.

Kierownik grantu: dr Artur Różański, SONATA

Grant realizowany od 29.08.2012 do 28.08.2016

Wytworzono modelowe układy polipropylen (kawitujący) oraz polipropylen/modyfikator o małej masie cząsteczkowej (nie-kawitujący) o identycznej strukturze krystalicznej różniące się stanem fizycznym obszarów nie-krystalicznych. W oparciu o pomiary rentgenowskie oraz spektroskopię czasu życia anihilujących pozytonów (PALS) wyjaśniono przyczyny zmiany intensywności zjawiska kawitacji podczas deformacji analizowanych układów. W oparciu o w/w układy gruntownie przeanalizowano oraz wykazano wpływ zjawiska kawitacji na wartość naprężenia/odkształcenia na granicy plastyczności, intensywność fragmentacji lamel, dynamikę reorientacji komponentu krystalicznego oraz amorficznego podczas odkształcania, stopień orientacji krystalitów na różnych etapach deformacji oraz ilość ciepła generowaną na skutek aktywacji poszczególnych mechanizmów deformacji plastycznej.

Zaprezentowano jednocześnie, w oparciu o pomiary PALS oraz obserwowaną zmianę wartości długiego okresu, metodę umożliwiającą wyznaczenie faktycznej zawartości modyfikatora w obszarach międzylamelarnych. W efekcie realizacji poszczególnych zadań niniejszego projektu w 2015 roku ukazały się następujące prace: *European Polymer Journal*, 69, 2015, 186-200, *Polymer* 2015, 70, 127-138, *Macromolecules* 2015, 48(15), 5310-5322 oraz w wersji elektronicznej: *Journal of Polymer Science: part B, Polymer Physics*, 10.1002/polb.23911.

Grant NCN, nr umowy UMO-2011/03/B/ST8/06126

Możliwości wielofunkcyjnej modyfikacji tkanin zawierających sieć przewodząca utworzoną z wielościennych nanorurek węglowych.

Kierownik grantu: dr Tomasz Makowski, OPUS

Grant realizowany od 05.09.2012 do 04.09.2015

Celem badań było wytworzenie próbek tkanin poliestrowych z przewodzącą siecią nanorurek węglowych. Do otrzymania przewodzących tkanin zastosowano metodę napawania oraz metodę dip-coating przy użyciu dyspersji wielościennych nanorurek węglowych w wodnym roztworze środka powierzchniowo czynnego (SDS). Proces nanoszenia przeprowadzono na tkaniny poliestrowych, powtarzano w celu zwiększenia ilości nanorurek a w konsekwencji zwiększenia gęstości sieci przewodzącej. Otrzymano próbki o oporności

mniejszej od $1 \text{ k}\Omega/\text{cm}^2$. Otrzymane próbki zostały zoptymalizowane pod względem jednorodności nanoszenia na powierzchnię tkanin. Tak otrzymane tkaniny posłużyły do wykonania pomiarów przewodnictwa w różnych temperaturach. Tkaniny z przewodzącą siecią nanorurek zostały podane reakcji hydrosililowania w celu otrzymania powierzchni super-hydrofobowych. Na powierzchni tkaniny zostały wytworzone nanocząstki srebra nadając w ten sposób tkaninom właściwości antybakteryjnych w procesie elektrochemicznym. Wytworzone tkaniny posłużyły również, jako elektrody w procesie elektrochemicznym i wytworzono na ich powierzchni polipirol. Wyniki zostały zaprezentowane w publikacjach.

Grant NCN, nr umowy UMO-2012/04/A/ST5/00606

Nowa generacja nanokompozytów polimerowych i nanowłókien polimerowych wytwarzanych in situ poprzez odkształcenie plastyczne kryształów polimerowych.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Andrzej Gałęski MAESTRO

Grant realizowany od 14.09.2012 do 13.01.2016

Kontynuowano badania nad otrzymywaniem nanokompozytów na bazie poliolefin oraz termoplastycznych elastomerów zawierających nanowłókna polimerowe (HDPE, PTFE) wytwarzane poprzez odkształcenie plastyczne kryształów polimerowych. Okazało się, że ziarna PTFE składają się z kilkunastu grubych kryształów, które podczas mieszania z polimerami termoplastycznymi są zdolne do deformacji do postaci nanowłókien. Grubsze włókna PTFE organizują się w pęki (przykład mieszanina polimerowa LDPE/TPE z PTFE). Okazało się również, że splątana sieć nanowłókien PTFE w istotny sposób wpłynęła na poprawę właściwości reologicznych i mechanicznych mieszanin LDPE/TPE, w tym kilkukrotny wzrost współczynnika samowzmacniania materiałów w stanie stopionym, oraz nawet kilkunastokrotny wzrost modułu sprężystości materiałów zawierających 8% wag. nanowłókien PTFE w stosunku do niemodyfikowanych mieszanin LDPE/TPE oraz matrycy TPE. Zoptymalizowano metodę otrzymywania polipropylenu z ograniczoną gęstością splątań makrocząsteczek, poprzez zestalanie polimeru z rozcieńczonego roztworu w ksylenie lub w oleju mineralnym. Przeprowadzono badania reologiczne otrzymanych w ten sposób proszków polipropylenowych potwierdzając uzyskanie znacznie mniejszej gęstości splątań i badania mikroskopowe pokazujące strukturę ziaren proszków. Proszki tworzyły 30-50 mikrometrowe aglomeraty luźno związanych mniejszych ziaren. Uzyskany polipropylen został użyty do sporządzenia nanokompozytów, przy wykorzystaniu nowej metody opracowanej przez nasz zespół. Korzysta się w niej ze zwiększonej zdolności do odkształcania polimeru mającego ograniczoną liczbę splątań w fazie amorficznej. Podczas mieszania polipropylenu będącego w stanie stałym, z drugim, stopionym polimerem siły mieszające powodowały przekształcenie ziaren polipropylenu w nanowłókna. Po zestaleniu matrycy powstawał w ten sposób całkowicie polimerowy nanokompozyt. Wytworzono nanokompozyty mające matryce z polistyrenu, polietylenu o dużym ciężarze cząsteczkowym lub kopolimeru etylenowo-oktenowego i zawierające do 6% wagowych polipropylenu przekształconego w większości w nanowłókna. Pokazano, że efektywność powstawania włókien zależy od rodzaju użytego urządzenia mieszającego. Otrzymane nanokompozyty wszechstronnie scharakteryzowano, pokazując m.in., że średnica włókien wynosi typowo 100-200 nm. W badaniach mikroskopowych zaobserwowano, że małe ziarna polipropylenu o rozmiarach poniżej 0.7 mikrona nie ulegają deformacji we włókna. Powstające długie nanowłókna polipropylenowe mogą w procesie mieszania splątywać się, tworząc sieć wpływającą dodatkowo na właściwości mechaniczne nanokompozytu, co zaobserwowano w przypadku gdy matrycą był kopolimer etylenowo-oktenowy. Opracowano

3 manuskrypty publikacji.

Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/B/ST8/04306

Deformacja plastyczna polimerów częściowo

krystalicznych - rola topologii fazy amorficznej i morfologii fazy krystalicznej.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Zbigniew Bartczak, OPUS

Grant realizowany od 24.07.2015 do 23.07.2018

Wybrano materiały do badań, przygotowano pierwsze próbki. Rozpoczęto badania zachowania sieci molekularnej w fazie amorficznej liniowego PE pod wpływem wysokich odkształceń ściskających - wykonano badania przebiegu deformacji przez ściskanie, odwracalności odkształcenia w funkcji temperatury oraz badania spektroskopowe FTiR odkształconych próbek w celu określenia zmian strukturalnych. Stwierdzono bardzo niewielki wzrost zawartości grup karbonylowych w próbkach poddanych dużemu odkształceniu, $e > 1$, co może wskazywać na mechanizm degradacji mechanicznej sieci.

Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/B/ST8/04286

Wielofunkcyjna modyfikacja tkanin z naniesionymi nanocząstkami grafenu.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Ewa Piórkowska-Gałęska, OPUS

Grant realizowany od 22.09.2015 do 21.09.2018

We współpracy z Instytutem Włókiennictwa w Łodzi rozpoczęto prace dotyczące przygotowania tkanin (oczyszczenie, stabilizacja) do modyfikacji. Wykonano wstępne doświadczenia modyfikacji materiału bawełnianego nanocząstkami tlenku grafenu poprzez zanurzenie w wodnej zawieszynie tych nanocząstek.

Grant NCN, nr umowy UMO-2014/15/N/ST8/03756

Mechanizm heterogenicznego zarodkowania wysokociśnieniowej formy gamma izotaktycznego polipropylenu.

Kierownik grantu: mgr Przemysław Sowiński, PRELUDIUM

Grant realizowany od 03.08.2015 do 02.08.2017

Do izotaktycznego polipropylenu (PP) dodano różne środki zarodkujące poprzez mieszanie w stanie stopionym, w szczególności sól wapniową kwasu cis-1,2-cykloheksanodikarboksylowego - komercyjny Hyperform HPN 20E (Milliken Chemicals) oraz submikronowe ziarna politetrafluoroetyleny, PTFE (Polysciences). Rozpoczęto krystalizację tych materiałów w różnych warunkach termomechanicznych oraz wstępne badania struktury metodą skaningowej mikroskopii elektronowej po wytrawieniu mieszaniną kwasów H_2SO_4 i H_3PO_4 , z dodatkiem $KMnO_4$. Badania te pokazały istotne różnice w strukturze lamelarniej PP z dodatkiem różnych nukleantów. W PP z PTFE zaobserwowano znacznie większą niż w przypadku PP z solą wapniową zawartość lamel charakteryzujących się rozgałęzianiem po kątem 80° lub 100° typowym dla formy alfa, co wskazuje na tworzenie się zarodków w tej formie, na których krystalizuje później forma gamma.

Grant NCN, nr umowy: 2011/03/N/ST4/01721

Zastosowanie nowoczesnej spektroskopii NMR w badaniach kompleksów supramolekularnych i koordynacyjnych.

Kierownik grantu: mgr inż. Piotr Paluch

Grant realizowany od 20.08.2012 do 19.08.2015

W 2015 roku kontynuowane były badania zmierzające do zamknięcia wątków związanych z głównymi założeniami grantu.

Najistotniejszym osiągnięciem projektu było zaimplementowanie techniki odwrotnej detekcji oraz nowoczesnych sekwencji impulsowych (Back-to-Back, PMLG-JHETCOR, RFDR) do analizy struktury i oddziaływań w układach typu gość-gospodarz.

W toku prowadzonych badań wykazano oddziaływania diazobenzokoronandów z cząsteczkami wody i rozpuszczalnikami organicznymi (chloroform, DMSO) oraz określano ich wpływ na dynamikę badanych układów. Otrzymano nowy kompleks gość – gospodarz dla układu 5,10,15-tris(pentafluorofenyl)korol – toluen i określono jego strukturę. Zweryfikowano i skorygowano poglądy na temat procesów tautomerycznych zachodzących w roztworze wewnątrz układu makrocyklicznego w 5,10,15-tris(pentafluorofenyl)korolu.

Grant NCN, nr umowy: UMO-2014/13/B/ST4/03050

Nowe metodologie spektroskopii NMR w ciele stałym w badaniach struktury i dynamiki wybranych białek i peptydów.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Marek Potrzebowski, OPUS

Grant realizowany od 05.02.2015 do 04.02.2018

Głównym celem grantu jest opracowanie strategii eksperymentalnych z wykorzystaniem magnetycznego rezonansu jądrowego, które pozwolą zdefiniować strukturę i dynamikę molekularną w sieciach krystalicznych biomolekuł.

Ze względu na wątpliwości środowiska naukowego, co do precyzji i możliwości opracowanej w naszym zespole metody CPVC (Cross Polarization Variable Contact) wykonano szereg symulacji numerycznych w programie SIMPSON dla spornych kwestii eksperymentu. Wykazano że, sekwencja CPVC nie jest czuła na efekty przesunięcia chemicznego i anizotropii przesunięcia chemicznego, o ile sam pomiar wykonywany jest w warunkach szybkiego wirowania próbki z częstością powyżej 60 kHz (VF-MAS; Very Fast Magic Angle Spinning). Ponadto przeanalizowano wpływ odstrojenia warunków Hartmana-Hahna oraz niehomogeniczności pulsów RF na rejestrowane widma. Otrzymane dane teoretyczne potwierdziły precyzję i poprawność sekwencji CPVC w analizie dipolowych interakcji wiązania C-H, która pozwala na wyznaczenie długości wiązań i określenie lokalnej dynamiki badanego układu. Szczegóły tych prac zostały opublikowane w J. Magn. Reson. **2015**, 252, 67–77.

Kolejnym krokiem była próba wykorzystania sekwencji CPVC dla bardziej złożonych układów niż aminokwasy, peptydy czy proste związki organiczne. Wstępne wyniki uzyskane przy użyciu dwuwymiarowych eksperymentów CPVC w analizie krystalicznych białek, tj. GB-1 i DLC-8 były obiecujące. Zaobserwowano zróżnicowanie dynamiki różnych fragmentów łańcucha peptydowego w badanych układach, jednak ze względu na silne nakładanie się sygnałów nie było możliwe wykonanie analizy typu „site-specific”.

Problem ten udało się ominąć przy użyciu nowo zaprojektowanych sekwencji trójwymiarowych typu 3D CPVC-RFDR i CPVC-SHANGHAI. Dodatkowo, szczegółowa analiza kształtu otrzymanych linii pozwoliła nie tylko na określenie czy dany fragment białka jest dynamiczny ale też, w jaki sposób ulega rotacji. Wyniki tych badań zostały opublikowane w pracy w Phys.Chem.Chem.Phys. **2015**, *17*, 28789-28801.

Standardowe badania z wykorzystaniem sekwencji CPVC opierają się na detekcji jąder ^{13}C lub ^{15}N . Ze względu na ograniczenia związane z niską zawartością naturalną i niewielkimi wartościami współczynników żyromagnetycznych, czułość eksperymentu jest stosunkowo mała. Podjęto próbę wykorzystywania sekwencji inverse-HETCOR, przez co możliwe było zarejestrowanie widm CP-VC z detekcją jąder ^1H . Takie podejście spowodowało nawet kilkukrotny wzrost czułości i uzyskanie widm dobrej jakości w stosunkowo krótkim czasie. Stosując detekcję pośrednią możliwe było uzyskanie informacji o długości wiązań N-H i ich dynamice bez stosowania znakowanych układów izotopami ^{15}N . Szczegóły tych badań opublikowano w Solid State Nucl Magn Reson.-DOI: 10.1016/j.ssnmr.2015.06.005.

W projekcie zostały również zaplanowane badania dotyczące teoretycznych możliwości przewidywania parametrów NMR, które mogłyby być niezwykle pomocne w interpretacji danych strukturalnych. W tym celu konieczne było przygotowanie układu modelowego. Do badań zaproponowano cykliczną mini-proteinę TrpCage(TC1), która tworzy niezwykle ciekawe układy polimorficzne o zróżnicowanej liczbie cząsteczek w części niezależnej komórki elementarnej. Zoptymalizowano warunki krystalizacji białka TC1 w stosunku do tych opisanych w literaturze, które jednak nie pozwalały na uzyskanie materiału o odpowiedniej krystaliczności. Za pomocą analizy X-ray określono grupę przestrzenną, parametry i skład komórki elementarnej otrzymanych kryształów. Materiał ten będzie wykorzystany w zaawansowanych eksperymentach NMR, których wyniki zostaną skorelowane z danymi z obliczeń mechaniki kwantowej i mechaniki molekularnej.

Grant NCN, nr umowy: UMO-2014/13/N/ST5/03444

Zastosowanie techniki HRMAS w badaniach enkapsulowanych leków przeciwnowotworowych w mezoporowatej nanokrzemionce.

Kierownik grantu: mgr Ewa Skorupska, PRELUDIUM

Grant realizowany: od 05.02.2015 do 04.02.2017

Badania wstępne dotyczyły sprawdzenia skuteczności metod wprowadzania leków przeciwnowotworowych w mezopory nanokrzemionek typu MCM-41 i SBA-15. W tym celu przygotowano próbki MCM-41 i SBA-15 z cyklofosfamidem poprzez nasączenie matrycy niewielkimi objętościami roztworu leku oraz długie mieszanie matrycy w roztworze substancji leczniczej. Cyklofosfamid rozpuszczono w etanolu. Obie metody należą do tzw. metod „mokrych” i jak zostało to już wykazane, cząsteczki rozpuszczalnika mogą konkurować z cząsteczkami leku z powodu większego powinowactwa do ścian w porach krzemionek. Podjęta została też próba umieszczenia cyklofosfamidu poprzez wtopienie leku w matrycę, czyli bez udziału dodatkowego medium. Otrzymane w ten sposób próbki scharakteryzowano z wykorzystaniem eksperymentów ^{13}C SPE MAS, ^{13}C CP MAS, ^{31}P SPE MAS i ^1H MAS NMR, na podstawie których potwierdzono obecność leku wewnątrz porów MCM-41. Kolejnym krokiem będzie zastosowanie eksperymentów z wykorzystaniem techniki HRMAS.

Grant NCN, nr umowy: UMO-2015/16/S/ST4/00466

Badania struktury i dynamiki procyjanidyn pochodzenia naturalnego z wykorzystaniem krystalografii NMR.

Kierownik grantu: dr Marta Dudek, FUGA

Grant realizowany: od 01.10.2015 do 30.09.2017

Realizację grantu rozpoczęto od badań monomeru konstytuującego procyjanidyny, tj. katechiny. Otrzymano krystaliczną formę katechiny, opisywaną w literaturze jako 4,5-hydrat, jak również nie opisany dotąd strukturalnie, monohydrat oraz dwie inne mikrokrystaliczne formy katechiny, zawierające w kryształach, obok cząsteczek wody, cząsteczki metanolu. Dla wszystkich form zmierzono składowe tensorów ekranowania za pomocą sekwencji 2D-PASS – otrzymane wyniki wskazują na różnice w upakowaniu i sieci wiązań wodorowych otrzymanych solwatomorfów.

Przeprowadzone do tej pory badania wykazały również, że 4,5-hydrat katechiny łatwo przechodzi w monohydrat i na odwrót, a proces ten jest szybszy dla kryształów, które były już uprzednio nawadniane i odwadniane, niż dla kryształów otrzymanych świeżo po krystalizacji. Nawadnianie katechiny związane jest z formowaniem się w jej strukturze kanałów wodnych, w które cząsteczki wody mogą dość swobodnie wchodzić, po czym z nich wychodzić. Katechina stosowana jest w wielu oznaczeniach analitycznych (np. w oznaczeniu zawartości polifenoli, testach antyoksydacyjnych) jako wzorzec do krzywej kalibracyjnej. Stopień jej uwodnienia, który, jak wykazały przeprowadzone badania, bardzo silnie zależy od wilgotności otoczenia, może w sposób znaczny wpływać na zawyżenie bądź zaniżenie otrzymanych w tych oznaczeniach wyników.

Dłuższe suszenie katechiny (powyżej 3 dni) prowadzi do otrzymania postaci znacznie mniej uporządkowanej, a w końcu amorficznej. Z kolei umieszczenie wysuszonej katechiny w środowisku innych rozpuszczalników (metanol, etanol, aceton), bez bezpośredniego kontaktu z nimi, powoduje, że cząsteczki rozpuszczalnika swobodnie wchodzi w kryształy katechiny, skutkując jej innym uporządkowaniem.

Grant NCN, nr umowy: UMO-2013/11/N/ST5/02040

Synteza i badania strukturalne modyfikowanych porfirynoidów.

Kierownik grantu: mgr Justyna Śniechowska, PRELUDIUM

Grant realizowany: od 25.08.2014 do 24.08.2017

W ramach dotychczasowych badań przeprowadzono reakcję Dielsa-Aldera dla wcześniej zsyntezowanych i sfunkcjonalizowanych porfiryn. Charakter elektronowy i steryczny wprowadzonych podstawników sprawił, iż tylko część układów porfiryńowych uległa reakcji cykloaddycji z generowanym *in situ* dienem. Na podstawie otrzymanych wyników wykazano, że dobudowanie dodatkowego pierścienia zachodzi na pirolu, który w makrocyklu znajduje się naprzeciwko pirolu z podstawnikiem. Wszystkie uzyskane produkty zostały poddane wnikliwej analizie strukturalnej z wykorzystaniem spektroskopii NMR w cieczy. Wyznaczono również struktury tautomeryczne.

W celu wyznaczenia regiochemii reakcji cykloaddycji na porfirynach postanowiono zastosować różne dieny. Przeprowadzono reakcję Dielsa-Aldera o odwróconym charakterze elektronowym (ang. Inverse electron demand Diels–Alder reaction). W wyniku reakcji β -NH₂-5,10,15,20-tetrafenyloporfiryny z otrzymanymi tetrazynami otrzymano nieoczekiwany produkt, którego struktura jest obecnie ustalana za pomocą spektroskopii NMR i spektrometrii mas.

Dodatkowo podjęto próby wprowadzenia w pozycję β atomu fluoru. Jak dotąd, w literaturze chemicznej opisanych jest wiele metod fluorowania związków organicznych, natomiast żadna z nich nie była stosowana dla porfirynoidów.

Projekty realizowane w ramach Narodowego Centrum Badań i Rozwoju

Technologia wytwarzania laktydów z kwasu mlekowego (LACMAN)

Grant NCBiR, nr umowy PBS2/A1/12/2013, projekt koordynowany przez Politechnikę Warszawską

Kierownik Zadania: prof. dr hab. Stanisław Słomkowski

Pełnomocnik Kierownika: prof. dr hab. Andrzej Duda

Projekt realizowany: 2013 - 2016

Celem prowadzonych badań było zbadanie zdolności do kontrolowanej polimeryzacji monomerycznego laktydu (LA) wytworzonego w Politechnice Warszawskiej. Przeprowadzone badania kinetyczne polimeryzacji oraz pomiary mas molowych otrzymanego polilaktydu (PLA) wykazały, że typowe inicjatory metaliczne (jak np. oktanian cyny (II) ($\text{Sn}(\text{Oct})_2$) lub pochodne tris-izopropoksyglinu ($\text{Al}(\text{OiPr})_3$) prowadzą do powtarzalnych wyników i umożliwiają syntezę homo- i kopolimerów LA o założonych parametrach molekularnych. Podobne wyniki zostały uzyskane również z zastosowaniem mniej standardowych inicjatorów, takich jak pochodne silseskwioksanów, silnych zasad organicznych oraz w procesach kopolimeryzacji z cyklicznymi węglanami. Wykazano, że zdolność do polimeryzacji LA wytworzonego na podstawie oryginalnego opracowania w ramach grantu nie ustępuje produktom NatureWorks, Purac i innych znanych producentów LA.

Badano, również możliwości syntezy materiału hybrydowego polimerowo – nieorganicznego, w którym składnikiem polimerowym jest polilaktyd (PLA) a składnikiem nieorganicznym węglan wapnia. PLA postanowiono związać z węglanem wapnia za pomocą łączników, które w swojej strukturze zawierają jonowe grupy funkcyjne zdolne do silnego wielopunktowego wiązania z jonami wapnia znajdującymi się na powierzchni kredy, oraz grupy funkcyjne zdolne do inicjowania polimeryzacji laktydu. Przeprowadzono serię polimeryzacji L,L-laktydu inicjowanych makroinicjatorem silseskwioksanowym modyfikowanym funkcją hydroksylową w każdym narożniku klatki. Produkt scharakteryzowano metodą MALDI TOF i spektroskopią ^1H , ^{13}C NMR. Wykonano reakcję blokowania końcowych grup hydroksylowych kopolimeru gwiazdowego POSS(CH₂)₂S(CH₂)₆-PLA, Mn=28 tys, kwasem formylobenzoesowym w reakcji estryfikacji. Wprowadzona w ten sposób funkcja aldehydowa zostanie wykorzystana do szczepienia dużych cząsteczek o potencjalnych właściwościach terapeutycznych poprzez utworzenie wrażliwego na zmianę pH wiązania iminowego.

Część wyników badań podsumowano w trzech publikacjach: (a) K. Rozga-Wijas, W. A. Stanczyk, J. Kurjata, S. Kazmierski, *Star-Shaped and Linear POSS-Polylactide Hybrid Copolymers*, *Materials* **8**, 4400-4420 (2015) (b) S. Sosnowski, P. Lewinski, *L-Lactide polymerization catalysed by tin(II) 2-ethyl-hexanoate. A deeper look at chain transfer reactions*, *Polym. Chem.*, **6**, 6292-6296 (2015) oraz (c) M. Socka, A. Duda, A. Adamus, R. A. Wach, P. Ulański, *Lactide/trimethylene carbonate triblock copolymers: controlled sequential polymerization and properties* – wysłana do redakcji czasopisma *Polymer*.

Wyniki badań były również prezentowane w wykładzie na zaproszenie: A. Duda, M. Socka, T. Biela, M. Brzeziński, *Polymerization of Lactides - from Fundamental Studies to Block Copolymers and Stereocomplexes*, IUPAC International Conference on Advanced Polymers via Macromolecular Engineering 2015 (APME2015), 18-22.10.2015, Yokohama, Japonia.

Opracowanie receptur i technologii wytwarzania nowych odmian uniepalnionych poliolefinowych materiałów porowatych (NIEPALPIAN) projekt koordynowany przez Instytut Ciężkiej Syntezy Organicznej „Błachownia”.

Grant NCBiR, INNOTECH-K3/IN3/24/227425/NCBR/14.

Kierownik zadania: prof. dr hab. A. Gałęski

Projekt realizowany: 2014-2015

Przeprowadzono badania nad modyfikacją termoplastycznych elastomerów mającą na celu uzyskanie materiałów zdolnych do spieniania metodą ciągłego wyłaczania. Okazało się, że liniowy polietylen niskiej gęstości, LLDPE, podczas mieszania w reomikserze ulega modyfikacji fizycznej (bez użycia nadlenków) w warunkach termomechanicznych. W konsekwencji otrzymany materiał zawiera kilka procent długich rozgałęzień, które w znaczny sposób poprawiają wytrzymałość materiału w stanie stopionym, która niezbędna jest do otrzymywania pianek zamkniętokomorowych.

Projekty realizowane w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

„Ochrona patentowa nowych połączeń chemicznych o działaniu przeciwnowotworowym oraz metod ich syntezy”, CBMiM PAN, Łódź.

Kierownik grantu: prof. dr hab. Piotr Bałczewski, prof. dr hab. Barbara Nawrot

Projekt realizowany: 01.10.2012 – 31.08.2015

Program Operacyjny Innowacyjna Gospodarka 1.3.2, na lata 2007- 2013 Priorytet I: Badania i rozwój nowoczesnych technologii, Działanie 1.3: Wsparcie projektów B+R na rzecz przedsiębiorców realizowanych przez jednostki naukowe, Podziałanie 1.3.2: Wsparcie ochrony prawnej własności przemysłowej tworzonej w jednostkach naukowych w wyniku prac B+R, POIG.01.03.02-10-022/11.

W ramach realizacji poddziałania 1.3.2: Wsparcie ochrony własności przemysłowej tworzonej w jednostkach naukowych w wyniku prac B+R, zrealizowano wszystkie zadania przewidziane do realizacji w 2015, polegające na wykonaniu wskaźnika produktu w postaci zgłoszeń patentowych krajowych i zgłoszeń patentowych europejskich. Zadania te obejmowały 2 zgłoszenia patentowe: 1) Zastosowanie medyczne soli tryfenylofosfoniowych”, Piotr Bałczewski, Joanna Skalik, Barbara Nawrot, Marcin Cieślak, Julia Kaźmierczak-Barańska, P-413297, data 31.07.2015 oraz 2) „Medical use of triphenylphosphonium salts” - Piotr Bałczewski, Joanna Skalik, Barbara Nawrot, Marcin Cieślak, Julia Kaźmierczak-Barańska, EP15460043.1, 13.08.2015.

Inne

„Enzyme-promoted synthesis of chiral analogues of 1,3,5-triaza-7-phospha-adamantane (PTA), potential water-soluble phosphine ligands and catalysts.”

Projekt POMOST/2013-8/9 realizowany w ramach programu granty powrotowe Fundacji na rzecz Nauki Polskiej, współfinansowany przez Unię Europejską z Europejskiego Funduszu Regionalnego.

Kierownik projektu dr Małgorzata Kwiatkowska

projekt realizowany: 01.02.2014 – 31.12.2015

- Otrzymanie racemicznych hydroksylowych pochodnych siarczków PTA(S)-CH(OH)R (R= fenyl, *p*-bromofenyl, *p*-*N,N*-dimetyloamino-fenyl), próby zastosowania ich w reakcji enzymatycznego i chemicznego acetylowania oraz w reakcji mesylowania.
- Przeprowadzenie syntez racemicznych aminowych pochodnych PTA-CR¹R²NHR z wykorzystaniem reaktywnego syntonu PTA-Li i imin ((CH₃)₂C=NCH₂Ph, PhCH=NPh, PhCH=NCH(CH₃)Ph i (CH₃)₂C=NCH(CH₃)Ph).
- Próby syntezy enancjomerycznie czystych estrowych pochodnych PTA-CO₂Me i P-siarczku PTA(S)-CO₂Me na drodze enzymatycznej hydrolizy.
- Próby syntezy enancjomerycznie czystej estrowej pochodnej siarczku PTA(S)-CO₂Me w wyniku enzymatycznej aminolizy.
- Otrzymanie racemicznej pochodnej PTA zawierającej pierwszorzędową grupę hydroksylową PTA-CH₂OH w wyniku redukcji P-siarczku estru PTA(S)-CO₂Me oraz w reakcji reaktywnego syntonu PTA-Li z paraformaldehydem. Reakcja enzymatycznego acetylowania tej pochodnej prowadzona w warunkach kinetycznego rozdziału w obecności różnych enzymów doprowadziła do otrzymania enancjomerycznie wzbogaconych produktów. Acetylową pochodną oraz nieprzereagowany alkohol otrzymano z nadmiarami enancjomerycznymi, odpowiednio, do 20% i 70%.
- Zsyntetyzowanie kompleksów hydroksylowej pochodnej PTA-CH(OH)Ph oraz aminowej pochodnej PTA-CH(Ph)NHPH z metalami przejściowymi (ruten i rod) w ramach współpracy z partnerem zagranicznym. Zarówno hydroksylowa, jak i aminowa pochodna PTA zostały użyte w postaci mieszaniny diastereoizomerów. Utworzone diastereomeryczne kompleksy z metalami przejściowymi zostały rozdzielone na poszczególne diastereoizomery.

Analiza parametrów ekranowania w spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR)-korelacje między danymi eksperymentalnymi a teoretycznymi.

Grant Polskiej Infrastruktury Informatycznego Wspomagania Nauki w Europejskiej Przestrzeni Badawczej (PL-GRID).

Analiza parametrów ekranowania w spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR)-korelacje między danymi eksperymentalnymi a teoretycznymi.

ACK CYFRONET AGH Grant No. MNiSW/IBM_BC_HS21/CBMMPAN/029/2011.

**SPRAWOZDANIE
ZE WSPÓŁPRACY Z ZAGRANICĄ**

Wymiana osobowa

W 2015 roku w CBMiM PAN gościło 9 pracowników naukowych z zagranicy, a 68 pracowników Centrum przebywało za granicą (w tym dwie osoby na stażu podoktorskim). Pobyty i wyjazdy te realizowane były w ramach:

- wymiany bezdewizowej (finansowanie przez PAN),
- zgłoszeń do programów dotyczących współpracy międzynarodowej na podstawie umów międzyrządowych (finansowanie statutowe).

Ocena merytoryczna i wnioski

Współpraca naukowa z zagranicą, a szczególnie realizacja wspólnych projektów badawczych odgrywa istotną rolę w realizowaniu programu badawczego CBMiM PAN. W 2015 r. wspólnie z partnerami z zagranicy opublikowano 32 prace.

SPIS
PUBLIKACJI, REFERATÓW i KOMUNIKATÓW

Spis publikacji wydrukowanych w 2015 r.

a. Monografie (rozdziały), syntezy, podręczniki:

1. P. Bałczewski, J. Skalik
Quinquevalent phosphorus acids
Organophosphorus Chemistry (review 01.01.2013 - 01.12.2013), **44**, 288-376 (2015)
2. M. Jayaram, C. H. Ma, A. H. Kachroo, P. A. Rowley, P. Guga, H. F. Fan, Y. Voziyanov
An Overview of Tyrosine Site-specific Recombination: From an Flp Perspective.
in "Mobile DNA III" Eds N. L. Craig, M. Chandler, A. M. Lambowitz, M. Gellert, P. A. Rice and S. Sandmeyer (American Society of Microbiology, Washington, D.C.), pp 43-71 (2015)
3. A. Chworos, W. Smitthipong
Bio-inspired materials
in Bio-Based Composites for High-Performance Materials: From Strategy to Industrial Application, CRC Press, Taylor & Francis, (2015), 2, pp. 43-58.
4. M. Brzeziński, T. Biela
Stereo-complexed Poly(lacides)
in Encyclopedia of Polymeric Nanomaterials, Springer, Eds. Shiro Kobayashi, Klaus Müllen, (2015), Vol.3, pp. 2274-2281.
5. V. Beloshenko, Y. Beygelzimer, Yu. Voznyak
Solid-State Extrusion
in Encyclopedia of Polymer Science and Technology, pp.1-16, Wiley, (2015),
doi:10.1002/0471440264.pst343.pub2
6. A. Różański, A. Krajenta
Modyfikacja fazy amorficznej polipropylenu-wpływ na wybrane właściwości termo-mechaniczne
Modyfikacja Polimerów. Stan i perspektywy w roku 2015. Red. R. Steller, D. Żuchowska; Wyd.Tempo, s.c., Wrocław, 408-412 (2015)

b. Artykuły przeglądowe:

1. D. Krasowska, J. Chrzanowski, J. Drabowicz
Chapter four - Heterocycles with a stereogenic phosphorus or sulfur atom derived from aminoalcohols or aminonaphthols
Advances in Heterocyclic Chemistry, **117**, 179-259 (2015)
IF 1.783
30 pkt.
2. E. Radzikowska, R. Kaczmarek, J. Baraniak.
Synteza modyfikowanych oligonukleotydów zawierających stereozdefiniowane internukleotydowe wiązania tiofosforanowe
Wiadomości Chemiczne **69**, 957-981 (2015)
7 pkt.
3. S. Penczek, J. Pretula, P. Kubisa, K. Kaluzynski, R. Szymanski
Reactions of H₃PO₄ forming polymers. Apparantly simple reactions leading to sophisticated structures and application
Progress in Polymer Science **45**, 44-70 (2015)
IF 26.932
50 pkt.
4. P. Kubisa et. al.

Nomenclature and graphic representations for chemically modified polymers (IUPAC Recommendations 2014)

Pure Appl. Chem. **87**, 307-319 (2015)

IF 3.112

30 pkt.

5. M. Brzeziński, T. Biela
Micro- and nano-structures of PLA stereocomplexes and their biomedical application
Polymer International **64**, 1667-1675 (2015)
IF 2.409
30 pkt.
6. M. Gosecka, T. Basinska
Hydrophilic polymers grafted surfaces – preparation, characterization and biomedical applications Achievements and challenges
Polym. Adv. Technol. **26**, 696-706, (2015)
IF 1.757
30 pkt.
7. M. Gosecka, M. Gosecki
Characterization methods of polymer core-shell particles
Colloid Polym. Sci. **293**, 2719–2740, (2015)
IF 1.865
25 pkt.
8. B. Miksa
Recent progress in designing the shell cross-linked polymer capsules for a drug delivery
RSC Advance, **5**, 87781-87805, (2015)
IF 3.840
35

c. Artykuły naukowe:

1. B. Łukasik, M. Mikołajczyk, G. Bujacz, R. Żurawiński
Synthesis and absolute configuration of both enantiomers of 4,5-dihydro-3-(formyl)cyclopent-2-enone acetonide as a new chiral building block for prostanoid synthesis
Org. Biomol. Chem., **13**, 807-816 (2015)
IF 3.562
35 pkt.
2. S. M. Mignani, M. Bryszewska, B. Klajnert-Maculewicz, M. Zabłocka, J.-P. Majoral
Advances combination therapies based on nanoparticles for efficacious cancer treatment: an analytic report
Biomacromolecules, **16**, 1-27 (2015)
IF 5.750
40 pkt.
3. B. Bujnicki, J. Drabowicz, M. Mikołajczyk
Acid catalyzed alcoholysis of sulfinamides: unusual stereochemistry, kinetics and a question of mechanism involving sulfurane intermediates and their pseudorotation
Molecules, **20**, 2949-2972 (2015)
IF 2.416
30 pkt.
4. B. Pawłowska, R. Biczak, P. Bałczewski
Fitotoksyczność kwasu 2,2'-tiodioctowego w stosunku do wybranych roślin wyższych
Inżynieria i Ochrona Środowiska. (Engineering and Protection of Environment), **16**, 487-498 (2013)
(nieuwzględniona w roku 2013)
5 pkt.
5. P. Bałczewski, J. Skalik, P. Uznański, D. Guziejewski, W. Ciesielski

- Use of isomeric, aromatic dialdehydes in synthesis of photoactive, positional isomers of higher analogs of o-bromo(hetero)acetaldehydes*
RSC Adv., **5**, 24700–24704 (2015)
IF 3.840
35 pkt
6. J. Drabowicz, H. Jakubowski, M. H. Kudzin, Z. H. Kudzin
The nomenclature of 1-aminoalkylphosphonic acids and derivatives: evolution of the code system
Acta Biochim. Polon., **62**, 139-150 (2015)
IF 1.153
15 pkt.
7. G. Mlostoń, P. Grzelak, M. Mikina, A. Linden, H. Heimgartner
Hetero-Diels-Alder Reactions of Aryl and Hetaryl Thioketones with Acetylenic Dienophiles
Beilstein J. Org. Chem., **11**, 576-582 (2015)
IF 2.762
30 pkt.
8. M. Kwiatkowska, I. Janicki, P. Kiełbasiński
Enzyme-promoted kinetic resolution of acetoxymethyl aryl sulfoxides
J. Mol. Catal. B: Enzymatic, **118**, 23-28 (2015)
IF 2.128
25 pkt.
9. D. Cembrowska-Lech, M. Koprowski, J. Kępczyński
Germination induction of dormant Avena fatua caryopses by KAR1 and GA3 involving the control of reactive oxygen species (H₂O₂ and O₂^{•-}) and enzymatic antioxidants (superoxide dismutase and catalase) both in the embryo and the aleurone layers
J. Plant Physiol., **176**, 169–179 (2015)
IF 2.557
35 pkt.
10. R. Biczak, B. Pawłowska, P. Bałczewski, B. Bachowska, B. Herman
Phytotoxicity of ionic liquid containing phosphorus atom
Ecol. Chem. Eng. A, **20**, 621-630 (2013)
(nieuwzględniona w roku 2013)
6 pkt.
11. R. Biczak, P. Bałczewski, B. Pawłowska, B. Bachowska, P. Rychter
Comparison of phytotoxicity of selected phosphonium ionic liquid
Ecol. Chem. Eng. S, **21**, 281-295 (2014)
(nieuwzględniona w roku 2014)
IF 0.558
15 pkt.
12. T. Wasiak, M. Marcinkowska, I. Pieszynski, M. Zablocka, A.-M. Caminade, J.-P. Majoral, B. Klajnert-Maculewicz
Cationic phosphorus dendrimers and therapy for Alzheimer's disease
New J. Chem., **39**, 4852-4859 (2015)
IF 3.086
30 pkt.
13. R. Żurawiński, M. Mikołajczyk, M. Cieślak, K. Królewska, J. Kaźmierczak-Barańska
Synthesis and in Vitro Cytotoxicity of Cross-Conjugated Prostaglandin A and J Series and Their Hydroxy Derivatives
Org. Biomol. Chem., **13**, 7000-7012 (2015)
IF 3.562
35 pkt.
14. J. Drabowicz, D. Krasowska, A. Łopusiński, P. Pokora-Sobczak, M. Urbaniak, M. Szyrej, W. Wieczorek
Phenol - derived chiral auxiliaries as substrates in the synthesis of optically active phosphonic acid derivatives: synthetic and structural aspects

- Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem., **190**, 681-690 (2015)
IF 0.561
15 pkt.
15. E. Krawczyk, G. Mielniczak, M. Koprowski, K. Owsianik
Asymmetric Synthesis of Eucomol via Enantioselective Oxidation of Enol Phosphates
Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem., **190**, 691-693 (2015)
IF 0.561
15 pkt.
16. P. Pokora-Sobczak, G. Mielniczak, D. Krasowska, A. Zając, J. Chrzanowski, J. Drabowicz
t-Butylphenyl-(1-naphthyl)phosphinothioic acids and their selenium analogs: synthesis of the racemic mixtures and attempts to isolate the enantiomers of t-butyl-1-naphthylphosphinothioic acid
Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem., **190**, 694-699 (2015)
IF 0.561
15 pkt.
17. A. Wzorek, A. Sato, J. Drabowicz, V. A. Soloshonok, K. D. Klika
Enantiomeric purification via the self-disproportionation of enantiomers (SDE) by chiral, gravity-driven chromatography: a case study using N-acetyl-1-(phenyl)ethylamine for optimizing the enantiopure yield and magnitude of the SDE
Helv. Chim. Acta, **98**, 147-159 (2015)
IF 1.138
25 pkt.
18. A. Kotali, F. Dimoulaki, E. Kotali, A. Maniadaki, P. A. Harris, E. Różycka-Sokołowska, P. Bałczewski, J. A. Joule
Synthesis of novel dehydroacetic acid N-arylohydrazone-derived boron heterocycles
Tetrahedron, **71**, 7245-7249 (2015)
IF 2.641
30 pkt.
19. E. Krawczyk, M. Koprowski, G. Mielniczak, K. Owsianik
Asymmetric Synthesis of 5,7-O-Dimethyleucomols via Enantioselective Oxidation of Enol Phosphates
Tetrahedron: Asymmetry, **26**, 876-883 (2015)
IF 2.155
25 pkt.
20. M. Dabrzalska, M. Zabłocka, S. Mignani, J.-P. Majoral, B. Klajnert-Maculewicz
Phosphorus dendrimers and Photodynamic therapy. Spectroscopic studies on two dendrimer-photosensitizer complexes: cationic phosphorus dendrimer with rose bengal and anionic phosphorus dendrimer with methylene blue
Int. J. Pharmaceut., **492**, 266-274 (2015)
IF 3.650
35 pkt.
21. B. Łukasik, W. Perlikowska, R. Żurawiński, M. Mikołajczyk
Synthesis of Enantiomerically Pure Stereomers of Rosaproston
J. Org. Chem., **80**, 9798-9802 (2015)
IF 4.721
35 pkt.
22. K. Ciepluch, B. Nyström, D. Appelhans, M. Zabłocka, M. Bryszewska, J. P. Majoral
Effect of dendritic polymers on a simple model biological membrane
J. Polym. Res, **22** (9) Art. 184 (2015)
IF 1.920
25 pkt.
23. W. H. Midura, J. Krysiak
Highly asymmetric cyclopropanation with two sulfinyl auxiliaries
Chirality 2015, **27**, 816-819
IF 1.886

- 25 pkt.
24. J. Pecyna, A. Jankowiak, D. Pociecha, P. Kaszyński
o-Carborane derivatives for probing molecular polarity effects on liquid crystal phase stability and dielectric behavior
J. Mater. Chem. C., **3**, 11412–11422 (2015)
IF 4.696
40 pkt.
25. M. Rachwalski, Z. Wujkowska, S. Leśniak, P. Kielbasiński
Highly efficient asymmetric aziridination of unsaturated aldehydes promoted by chiral heteroorganic catalysts
ChemCatChem, **7**, 3589-3592 (2015)
IF 4.556
35 pkt.
26. G. Salamończyk
Efficient synthesis of water-soluble, phosphonate-terminated polyester dendrimers
Tetrahedron Lett., **56**, 7161-7164 (2015)
IF 2.379
25 pkt.
27. M. Pyzalska, S. Zdanowska, D. Kulawik, V. Pavlyuk, J. Drabowicz, W. Ciesielski
Właściwości fizykochemiczne bromowanych wielościennych nanorurek węglowych funkcjonalizowanych tiofosforanem O-metylo-O-2-naftylo-L-N-metyloefedryniowym
Przem. Chem., **94**, 2189-2194 (2015)
IF 0.399
15 pkt.
28. P. Tokarz, P. Kaszyński, S. Domagała, K. Woźniak
The [closo-B₁₂H₁₁-1-IAr]- zwitterion as a precursor to monosubstituted derivatives of [closo-B₁₂H₁₂]₂
J. Organomet. Chem., **798**, 70-79 (2015)
IF 2.173
30 pkt.
29. P. Guga, A. Tomaszewska
Unexpected loss of stereoselectivity in ring-opening reaction of 2-alkoxy-2-thio-1,3,2-oxathiaphospholanes with a pyrophosphate anion
Chirality, **27**, 115-122 (2015)
IF 1.724
25 pkt.
30. E. Radzikowska, J. Baraniak
Synthesis of PS/PO-chimeric oligonucleotides using mixed oxathiaphospholane and phosphoramidite chemistry
Org. Biomol. Chem., **13**, 269-276 (2015)
IF 3.487
35 pkt.
31. A. Maciaszek, A. Krakowiak, M. Janicka, A. Tomaszewska-Antczak, M. Sobczak, B. Mikołajczyk, P. Guga
LNA units present in the (2'-OMe)-RNA strand stabilize parallel duplexes (2'-OMe)-RNA/[All-RP-PS]-DNA and parallel triplexes (2'-OMe)RNA/[All-RP-PS]-DNA/RNA. An improved tool for the inhibition of reverse transcription
Org. Biomol. Chem., **13**, 2375-2384 (2015)
IF 3.487
35 pkt.
32. E. Sochacka, R. H. Szczepanowski, M. Cypryk, M. Sobczak, M. Janicka, K. Kraszewska, P. Bartos, A. Chwiałkowska, B. Nawrot
2-Thiouracil deprived of thiocarbonylfunction preferentially base pairs with guanine rather than adenine in RNA and DNA duplexes
Nucleic Acids Res., **43**, 2499-2512 (2015)

IF 8.808
40 pkt.

33. A. P. Dabkowska, A. Michanek, L. Jaeger, M. Rabe, A. Chworos, F. Höök, T. Nylander, E. Sparr
Assembly of RNA nanostructures on supported lipid bilayers
Nanoscale, **7**, 583-596 (2015)
IF 6.739
40 pkt.
34. M. Krawiecka, B. Kuran, J. Kossakowski, M. Cieślak, J. Kazmierczak-Barańska, K. Królewska, B. Nawrot
Synthesis and Cytotoxic Properties of Halogen and Aryl-/Heteroarylpiperazinyl Derivatives of Benzofurans
Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry, **15**, 115-121 (2015)
IF 2.939
30 pkt.
35. J. Kaźmierczak-Barańska, Ł. Pęczek, P. Przygodzka, M. J. Cieślak
Downregulation of striatin leads to hyperphosphorylation of MAP2, induces depolymerization of microtubules and inhibits proliferation of HEK293T cells
FEBS Letters, **589**, 222-230 (2015)
IF 3.341
30 pkt.
36. M. Sierant, S. Kazmierski, A. Rozanski, P. Paluch, U. Bienias, B. J. Miksa
Nanocapsules for 5-fluorouracil delivery decorated with a poly(2-ethylhexyl methacrylate-co-7-(4-trifluoromethyl)coumarin acrylamide) cross-linked wall
New J. Chem., **39**, 1506-1516 (2015)
IF 3.159
30 pkt.
37. A. Tomaszewska-Antczak, P. Guga, B. Nawrot, G. Pratiel
Guanosine in a Single Stranded Region of Anticodon Stem–Loop tRNA Models is Prone to Oxidatively Generated Damage Resulting in Dehydroguanidinohydantoin and Spiroiminodihydantoin Lesions
Chem. Eur. J., **21**, 6381-6385 (2015)
IF 5.696
40 pkt.
38. M. Sierant, D. Piotrkowska, B. Nawrot
RNAi mediated silencing of cyclin-dependent kinases of G1 phase slows down the cell-cycle progression and reduces apoptosis
Acta Neurobiol. Exp., **75**, 36-47 (2015)
IF 2.24
15 pkt.
39. E. Lodyga-Chruscinska, M. Symonowicz, A. Sykula, A. Bujacz, E. Garribba, M. Rowinska-Zyrek, S. Oldziej, E. Klewicka, M. Janicka, K. Krolewska, M. Cieslak, K. Brodowska, L. Chruscinski
Chelating ability and biological activity of hesperetin Schiff base
J. Inorg. Biochem., **143**, 34-47 (2015)
IF 3.274
35 pkt.
40. M. Napiórkowska, M. Cieślak, J. Kaźmierczak-Barańska, K. Królewska, A. Czapl, B. Kuran
Synthesis and preliminary studies of biological activity of amino derivatives of 4-azatricyclo-[5.2.1.0^{2,6}]dec-8-ene-3,5-dione with silicon in the structure
Heterocyclic Commun., **21**, 19-24 (2015)
IF 0.0593
15 pkt.
41. N. Dyubankova, E. Sochacka, K. Kraszewska, B. Nawrot, P. Herdewijn, E. Lescrier
Contribution of dihydrouridine in folding of the D-arm in tRNA
Org. Biomol. Chem., **13**, 4960-4966 (2015)
IF 3.487

35 pkt.

42. A. Chwialkowska, E. Wielgus, G. Leszczynska, M. Sobczak, B. Mikolajczyk, E. Sochacka, B. Nawrot
An efficient approach for conversion of 5-substituted 2-thiouridines into corresponding desulfured 4-pyrimidinone products in already assembled RNA oligomers
Bioorg. Med. Chem. Lett., **25**, 3100-3104 (2015)
IF 2.33
25 pkt.
43. L. Peczek, K. Zuk, K. Stec-Michalska, M. Medrek, B. Nawrot
The influence of Helicobacter pylori eradication on the expression and methylation status of the FHIT gene in non-cancerous gastric mucosa of dyspeptic patients
Journal of Digestive Diseases, **16**, 385-394 (2015)
IF 1.959
20 pkt.
44. P. Bartos, K. Ebenryter-Olbinska, E. Sochacka, B. Nawrot
The C5 substituent governs the 2-thiouridines desulfuration pathway carried out in aqueous hydrogen peroxide. Conformational analysis of the resulting 4-pyrimidinone products
Bioorg. Med. Chem., **23**, 5587-5594 (2015)
IF 2.793
30 pkt.
45. J. Borowska, M. Sierant, D. Sanna, E. Łodyga-Chruscinska, E. Sochacka
DNA binding and cleavage studies of Copper(II) complexes with 2'-deoxyadenosine modified histidine moiety
J. Biol. Inorg. Chem., **20**, 989-1004 (2015)
IF 2.538
30 pkt.
46. L. Czernek, A. Chworos, M. Döchler
The Uptake of Extracellular Vesicles is Affected by the Differentiation Status of Myeloid Cells
Scand. J. Immunol., **82**, 506-514 (2015)
IF 1.739
15 pkt.
47. P. A. Rowley, A. H. Kachroo, Ch. Hui Ma, A. D. Maciaszek, P. Guga, M. Jayaram
Stereospecific suppression of active site mutants by Methylphosphonate substituted substrates reveals the stereochemical course of site-specific DNA recombination
Nucleic Acids Res., **43**, 6023-6037 (2015)
IF 8.808
40 pkt.
48. M. Szubert, J. Suzin, P. Stawerski, K. Kowalczyk-Amico, M. Duechler
Endometriosis and carcinosarcoma – hypothetical correlation or proven pathological way? Colon carcinosarcoma with origin in endometriotic foci
Ginekologia Polska, **86**, 547-550 (2015)
IF 0.601
15 pkt.
49. K. Jastrzębska, A. Maciaszek, R. Dolot, G. Bujacz, P. Guga
Thermal stability and conformation of antiparallel duplexes formed by P-stereodefined phosphorothioate DNA/LNA chimeric oligomers with DNA and RNA matrices
Org. Biomol. Chem., **13**, 10032-10040 (2015)
IF 3.562
35 pkt.
50. D. Jędrzejczyk, A. Chworos
Structural identification of the novel 3 way-junction motif. DNA and RNA
Nanotechnology, **2**, 35-40 (2015)
51. B. Nawrot, O. Michalak, B. Mikolajczyk, W. J. Stec

- Acyclic analogs of nucleosides based on tris(hydroxymethyl)phosphine oxide: synthesis and incorporation into short DNA oligomers*
Heterocyclic Comm., **21**, 303-314 (2015)
IF 0. 0.593
15 pkt.
52. Y. Mohammadi, H. A. Khonakdar, S. H. Jafari, M. R. Saeb, M. Golriz, U. Wagenknecht, G. Heinrich, S. Sosnowski, R. Szymański
Simulation of microstructural evolution during reactive blending of PET and PEN: Numerical integration of kinetic differential equations and Monte Carlo method
Macromol. Theory Simul. **24**, 152-167 (2015)
IF 1.667
25 pkt.
53. R. Szymański
Azeotropic equilibrium copolymerization
Macromol. Theory Simul. **24**, 413-418 (2015)
IF 1.667
25 pkt.
54. S. Sosnowski, P. Lewinski
L-Lactide polymerization catalysed by tin(II) 2-ethyl-hexanoate. A deeper look at chain transfer reactions
Polym. Chem., **6**, 6292-6296 (2015)
IF 5.520
45 pkt.
55. M. Brzeziński, T. Biela,
Supramolecular poly lactides by the cooperative interaction of the end groups and stereocomplexation,
Macromolecules **48**, 2994-3004 (2015)
IF 5.800
45 pkt.
56. P. Maksym-Bębenek, T. Biela, D. Neugebauer
Water soluble well-defined acidic graft copolymers based on a poly(propylene glycol) macromonomer
RSC Advances **5**, 3627-3635 (2015)
IF=3.708
35 pkt.
57. P. Lewinski, S. Sosnowski, S. Kazmierski, S. Penczek
L-Lactide polymerization studied by 1H NMR with diffusion-ordered spectroscopy (DOSY): a "One NMR Tube Experiment" providing data on monomer conversion, polymer structure, Mn and Mw
Polym. Chem., **6**, 4353-4357 (2015)
IF 5.520
45 pkt.
58. M. Baško, M. Bednarek, P. Kubisa
Cationic polymerization of L,L-lactide with hydroxyl substituted cyclic ethers
Polym. Adv. Technol. **26**, 804-813 (2015)
IF=1.964
30 pkt.
59. M. Bednarek, M. Basko, T. Biedron, E. Wojtczak, A. Michalski
Polymerization of lactide initiated by primary amines and catalyzed by a protic acid
Europ. Polym. J. **71**, 380-388 (2015)
IF 3.005
35 pkt.
60. G. Lapienis, R. Szymanski, S. Penczek
Star polymers formed by MPEG reaction with diepoxides. The course of reaction
Polymer **72**, 142-153 (2015)
IF 3.562
40 pkt.

61. M. Brzeziński, S. Seiffert
Monodisperse microspheres from supramolecular complexing poly(lactides)
Materials Letters **161**, 471-475 (2015)
IF 2.489
35 pkt.
62. M. Gosecka, J. Pietrasik, Ph. Decorse, B. Głębocki, M.M. Chehimi, S. Slomkowski, T. Basinska
Gradient poly(styrene-co-polyglycidol) grafts via silicon surface-initiated AGET ATRP
Langmuir **31**, 4853-4861, (2015)
IF 4.457
35 pkt.
63. A. Kowalewska, M. Nowacka
Synthesis of Ladder Silsesquioxanes by in situ Polycondensation of Cyclic Tetravinylsiloxanetraol
Silicon, **7**, 133-146 (2015)
IF 1.069
25 pkt.
64. M. Nowacka, A. Kowalewska, K. Gadzinowska
Alkali-metal-directed hydrolytic condensation of 3-mercaptopropyltrimethoxysilane
Silicon, **7**, 147-153 (2015)
IF 1.069
25 pkt.
65. A. Kowalewska, M. Nowacka, A. Tracz, T. Makowski
Supramolecular Self-Assembly of Linear Oligosilsesquioxanes on Mica – AFM Surface Imaging and Hydrophilicity Studies
Soft Matter **11**, 4818-4829 (2015)
IF 4.029
40 pkt.
66. A. Kowalewska, M. Nowacka, T. Makowski
Macroporous materials by self-assembly of linear oligo(phenylsilsesquioxanes)
eXPRESS Polymer Letters **9**, 984-1000 (2015)
IF 2.761
35 pkt.
67. M. Nowacka, A. Kowalewska, T. Makowski
Nanostructured Surfaces by Supramolecular Self-Assembly of Linear Oligosilsesquioxanes with Biocompatible Side Groups
Beilstein J. Nanotechnol., **6**, 2377-2387 (2015)
IF 2.670
35 pkt.
68. W. Fortuniak, J. Chojnowski, S. Slomkowski, A. Nyczyk-Malinowska, P. Pospiech, U. Mizerska
Solid ceramic SiCO microspheres and porous rigid siloxane microspheres from swellable polysiloxane particles
Materials Chemistry and Physics **155**, 83-91 (2015)
IF 2.259
35 pkt.
69. U. Mizerska, W. Fortuniak, P. Pospiech, J. Chojnowski, S. Slomkowski
Gamma Globulins Adsorption on Carbofunctional Polysiloxane Microspheres
J. Inorg. Organometal. Polym. Mater. **25** (3) 507-514 (2015)
IF 1.160
20 pkt.
70. U. Mizerska, W. Fortuniak, P. Pospiech, A. Sobczak, J. Chojnowski, S. Slomkowski
Hydrophilic-hydrophobic properties of SiOH-loaded and modified polysiloxane microspheres and their interaction with γ -globulin
Polymers for Advanced Technologies **26**, 855-864 (2015)
IF 1.757

30 pkt.

71. W. Zawartka, P. Pospiech, M. Cypryk, A.M. Trzeciak
Palladium supported on amino-propyl-functionalized polysiloxanes microspheres: Simple and effective catalyst for the Suzuki-Miyaura C-C coupling
Journal of Molecular Catalysis A: Chemical **407**, 230-235 (2015)
IF 3.615
30 pkt.
72. J. Makowiecki, E. Piosik, G. Neunert, R. Stolarski, W. Piecek, T. Martynski
Molecular organization of perylene derivatives in Langmuir-Blodgett multilayers
Optical Mater., **46**, 555-560 (2015)
IF 1.981
30 pkt.
73. K. Różga-Wijas, W.A. Stańczyk, J. Kurjata, S. Kaźmierski
Star-Shaped and Linear POSS-Polylactide Hybrid Copolymers
Materials, **8**, 4400-4420 (2015)
IF 2.651
35 pkt.
74. A. Janaszewska, K. Gradzińska, M. Marcinkowska, B. Klajnert-Maculewicz, W.A. Stańczyk
In Vitro Studies of Polyhedral Oligo Silsesquioxanes: Evidence for Their Low Cytotoxicity
Materials, **8**, 6062-6070 (2015)
IF 2.651
35 pkt.
75. T. Ganicz, J. Kurjata, R.J. Perry, W. A. Stańczyk
Organosilicon Fragrance Carriers
Silicon, **7**, 333-341 (2015)
IF 1.069
25 pkt.
76. A. M. Wrobel, P. Uznanski, A. Walkiewicz-Pietrzykowska, B. Glebocki, and E. Bryszewska,
Silicon Oxycarbide Thin Films by Remote Microwave Hydrogen Plasma CVD Using a Tetramethyldisiloxane Precursor
Chem. Vap. Deposition, **21**, 88-93 (2015)
IF 1.703
25 pkt.
77. E. Z. Frątczak, P. Uznański, M. E. Moneta
Characterization of molecular organization in pentacene thin films on SiO₂ surface using infrared spectroscopy, spectroscopic ellipsometry, and atomic force microscopy
Chemical Physics, **456**, 49–56 (2015)
IF 1.652
25 pkt.
78. A. M. Wrobel, P. Uznanski, A. Walkiewicz-Pietrzykowska
Silicon Oxycarbide Films Produced by Remote Microwave Hydrogen Plasma CVD using a Tetramethyldisiloxane Precursor: Growth Kinetics, Structure, Surface Morphology, and Properties
Chem. Vap. Deposition, **21**, 307-318 (2015)
IF 1.703
25 pkt.
79. M. A. Guseva, V.A. Gerasin, O.K. Garishin, V.V. Shadrin, O.A. Plekhov, A. Pawlak
Thermal effects under elastic and plastic deformation of polyethylene.
Polymer, **56**, 416-427 (2015)
IF=3.562
40 pkt.
80. A. Pawlak
Termowizja i metody rentgenowskie w badaniach polimerów krystalizujących.
Tworzywa Sztuczne w Przemysle, nr **2/2015**, 49-52 (2015)

81. J. Krajenta, A. Pawlak, A. Galeski
Formation of polypropylene nanofibers by solid state deformation during blending with molten polyethylene
Polimery **60**, 64-66 (2015)
IF=0.633
15 pkt.
82. O. P. Dimitriev, O.N. Kopylov, A. Tracz
Mechanisms of polyaniline film formation via solution casting: Intra-chain contraction versus inter-chain association
European Polymer Journal, **66**, 119-128 (2015)
IF=3.005
35 pkt.
83. K. Moraczewski, P. Rytlewski, R. Malinowski, A. Tracz, M. Zenkiewicz
Influence of DC plasma modification on the selected properties and the geometrical surface structure of polylactide prior to autocatalytic metallization
Materials Chemistry and Physics, **153**, 135-144 (2015)
IF=2.259
35 pkt.
84. M. Stepczynska, M. Zenkiewicz, A. Tracz
Changes in surface roughness of the polylactide film over time after modifying by corona discharge method
Przemysł Chemiczny, **94**, 62-65 (2015)
IF=0.399
5 pkt.
85. M. Grala, Z. Bartczak,
Morphology and mechanical properties of high density polyethylene-POSS hybrid nanocomposites obtained by reactive blending
Polymer Engineering and Science, **55**, 2058-2072 (2015)
IF=1.520
25 pkt.
86. K. Skołuca-Szary, A. Ramięga, W. Piaskowska, B. Janicki, M. Grala, P. Rieske, E. Stoczyńska-Fidelus, S. Piaskowski
Chitin dipentanoate as the new technologically usable biomaterial
Materials Science and Engineering: C, **55**, 50-60 (2015)
IF=3.008
25 pkt.
87. K. Jurczuk, A. Galeski, M. Mackey, A. Hiltner, E. Baer
Orientation of PVDF α and γ crystals in nanolayered films
Colloid Polym. Sci. **293**, 1289-1297 (2015)
IF=1.865
25 pkt.
88. M. Stępień, Ł. Figiel
Morphology evolution and macroscopic behaviour of PLA-organoclay nanocomposites during extensional rheology: Experimental study
Polymer Testing, **42**, 79-88 (2015)
IF=2.240
40 pkt.
89. V. A. Beloshenko, A. V. Voznyak, Y. V. Voznyak
Effects of equal-channel, multiple-angular extrusion on the physical and mechanical properties of glassy polymers
Journal of Applied Polymer Sci. **132**, art. 42180, (2015)
IF=1.768
25 pkt.

90. L. Jasinska-Walc, M. Bouyahyi, A. Rozanski, R. Graf, M. R. Hansen, R. Duchateau
Synthetic principles determining local organization of copolyesters prepared from lactones and macrolactones
Macromolecules, **48**, 502-510 (2015)
IF=5.800
45 pkt.
91. A. Rozanski A., R. Idczak
Influence of non-polymeric substances localized in the amorphous phase on selected properties of semicrystalline polymers
European Polymer Journal, **69**, 186-200 (2015)
IF=3.005
35 pkt.
92. P. Gelineau, M. Stepień, S. Weigand, L. Cauvin, F. Bédoui
Elastic properties prediction of nano-clay reinforced polymer using multi-scale modeling based on a multi-scale characterization
Mechanics of Materials, **89**, 12-22 (2015)
IF=2.49
40 pkt.
93. D. Weidt, L. Figiel
Effect of CNT waviness and van der Waals interaction on the nonlinear compressive behaviour of epoxy/CNT nanocomposites
Composites Science and Technology, **115**, 52-59 (2015)
IF= 3.569
50 pkt.
94. M. Wojtczak, S. Dutkiewicz, M. Pietrzak, A. Galeski, E. Piorkowska
Nucleation and crystallization of random aliphatic-butylene terephthalate copolyester
Europ.Polym.J., **71**, 289-303 (2015)
IF=3.198
35 pkt.
95. A. Krajenta, A. Rozanski,
Physical state of the amorphous phase of polypropylene-influence on thermo-mechanical properties
Polymer, **70**, 127-138 (2015)
IF=3,562
40 pkt.
96. A. Rozanski, A. Galeski,
Crystalline lamellae fragmentation during drawing of polypropylene
Macromolecules, **48(15)**, 5310-5322 (2015)
IF=5,800
45 pkt.
97. T. Makowski, T. Ganicz, W. Zajączkowski, W. Pisula, W. A. Stańczyk, A. Tracz
Synthesis and thermotropic behavior of side chain polysiloxane bearing triphenylene moiety
eXPRESS Polymer Letters, **9**, (7) 636-646 (2015)
IF= 2.953
35 pkt.
98. D. Kowalczyk, S. Brzezinski, T. Makowski, W. Fortuniak
Conductive hydrophobic hybrid textiles modified with carbon nanotubes
Applied Surface Science **357**, 1007-1014 (2015)
IF= 2.711
35 pkt.
99. T. Makowski, D. Kowalczyk, W. Fortuniak, S. Brzezinski, D. Kręgiel
Electrochemical deposition of silver nanoparticle and polymerization of pyrrole on fabrics via conducting multiwall carbon nanotubes
Cellulose **22**, 3063-3075 (2015)
IF= 3.573

45 pkt.

100. A. Zubrowska, E. Piorkowska, A. Kowalewska, M. Cichorek
Novel blends of polylactide with ethylene glycol derivatives of POSS
Coll. Polym. Sci. **293**, 23-33 (2015)
IF=2.005
25 pkt.
101. P. Sowinski, E. Piorkowska, S.A.E. Boyer, J.M. Haudin, K. Zapala
The role of nucleating agents in high pressure-induced gamma-crystallization in isotactic polypropylene.
Coll. Polym. Sci., **293**, 665-675 (2015)
IF=2.005
25 pkt.
102. M. Pluta, E. Piorkowska
Tough and transparent blends of polylactide with block copolymers of ethylene glycol and propylene glycol
Polymer Testing, **41**, 209-218 (2015)
IF=2.322
40 pkt.
103. M. Pluta, E. Piorkowska
Tough crystalline blends of polylactide with block copolymers of ethylene glycol and propylene glycol.
Polymer Testing, **46**, 79-87 (2015)
IF=2.322
40 pkt.
104. A. Zubrowska, R. Masirek, E. Piorkowska, L. Pietrzak
Structure, Thermal and Mechanical Properties of Polypropylene Composites with Nano- and Micro-diamonds
Polimery, **60**, 331-336 (2015)
IF = 0.617
15 pkt.
105. M. Pluta, E. Piorkowska
Modyfikacja polilaktydu kopolimerami blokowymi na bazie glikolu propylenowego
Przetwórstwo Tworzyw, Nr **5**, 36-46 (2015)
7 pkt.
106. P. Paluch, J. Trébosc, Y. Nishiyama, M.J. Potrzebowski, M. Malon, J.P. Amoureux
Theoretical study of CP-VC: A simple, robust and accurate MAS NMR method for analysis of dipolar C-H interactions under rotation speeds faster than ca. 60 kHz
J. Magn. Reson., **252**, 67-77 (2015)
IF 2.510
30 pkt.
107. W. Bocian, P. Paluch, A. Nowak-Król, D. T. Gryko, M. Potrzebowski, J. Śniechowska, J. Sitkowski, E. Bednarek, L. Kozerski
The ¹H, ¹³C, ¹⁵N, and ¹⁹F NMR chemical shifts assignments in 5,10,15-tris (pentafluorophenyl)tetra-15N corrole at 191 K
Magn. Reson. Chem., **53**, 167-171 (2015)
IF 1.179
20 pkt.
108. P. Paluch, T. Pawlak, M. Oszejca, W. Lasocha, M.J. Potrzebowski
Fine refinement of solid state structure of racemic form of phospho-tyrosine employing NMR Crystallography approach
Solid State Nucl. Magn. Reson., **65**, 2-11 (2015)
IF 2.266
30 pkt.
109. E. Skorupska, P. Paluch, A. Jeziorna, M. J. Potrzebowski

NMR Study of BA/FBA Cocrystal Confined Within Mesoporous Silica Nanoparticles Employing Thermal Solid Phase Transformation

J. Phys. Chem. C, **119**, 8652-8661 (2015)

IF 4.772

35 pkt.

110. D. Niedzielska, T. Pawlak, A. Wojtczak, L. Pazderski, E. Szlyk
Structural and ¹H, ¹³C, ¹⁵N NMR spectroscopic studies of Pd(II) chloride organometallics with 2-phenylpyridine and ammonia, pyridine or its methyl derivatives
Polyhedron, **92**, 41-51 (2015)
IF 2.011
25 pkt.
111. A. Jeziorna, K. Stopczyk, E. Skorupska, K. Lubierda-Durnas, M. Oszejca, W. Lasocha, M. Górecki, J. Frelek, M. J. Potrzebowski
Cyclic Dipeptides as Building Units of Nano- and Microdevices: Synthesis, Properties, and Structural Studies
Cryst. Growth Des., **15**, 5138-5148 (2015)
IF 4.891
40 pkt.
112. E. Wielgus, P. Paluch, J. Frelek, W. J. Szczepek, M. J. Potrzebowski
Full Characterization of Linezolid and Its Synthetic Precursors by Solid-State Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy and Mass Spectrometry
J. Pharm. Sci., **104**(11), 3883-3892 (2015)
IF 1.703
30 pkt.
113. P. Paluch, T. Pawlak, A. Jeziorna, J. Trébosc, G. Hou, A. J. Vega, J.-P. Amoureux, M. Dracinsky, T. Polenova, M. J. Potrzebowski
Analysis of local molecular motions of aromatic sidechains in proteins by 2D and 3D fast MAS NMR spectroscopy and quantum mechanical calculations
Phys. Chem. Chem. Phys., **17**, 28789-28801 (2015)
IF 1.856
35 pkt.
114. T. Pawlak, A. Kowalewska, B. Zgardzińska, M. J. Potrzebowski
Structure, Dynamics and Host-Guest Interactions in POSS Functionalized Cross-Linked Nanoporous Hybrid Organic-Inorganic Polymers
J. Phys. Chem. C, **119** (47), 26575-26587 (2015)
IF 4.772
35 pkt.
115. J. A. Gliński, M. Dudek, P. Kinkade, V. B. Gliński, S. Kaźmierski, J. Calixto
Honey, bees, and a hepatotoxic alkaloid echimidine.
Planta Medica., **81**(11), 935-936 (2015). (Notes: Meeting Abstract: PX28)
IF 2.152
25 pkt.
116. B. Naumczuk, K. Hyz, R. Kawęcki, W. Bocian, E. Bednarek, J. Sitkowski, E. Wielgus, L. Kozerski
DOSY NMR and MALDI-TOF evidence of covalent binding the DNA duplex by trimethylammonium salts of topotecan upon near UV irradiation
Magn. Reson. Chem., **53**, 565-571 (2015)
IF 1.179
20 pkt.
117. J. Drabowicz, J. Chrzanowski, D. Krasowska, A. Zając
Chirality of hypervalent chalcogenuranes. Current Organic Chemistry 2015; 20:(2):146-154
IF 2.157
30 pkt.
118. A. Krakowiak, D. Piotrkowska, Ł. Pęczek

Comparison of the expression and functionality of P2X7 receptors sensitive to ATP and Bz-ATP activation at different cell lines. FEBS Journal. 2015; 282: Meeting Abstract: P33-027(SI): 321-321 Supplement 1

Notes: 40th Congress of the Federation –of European-Biochemical-Societies (FEBS) - The Biochemical Basis of Life, 4 - 9 lipca 2015, Berlin, Niemcy
30 pkt.

119. Z. J. Kuliński, S. Kania, P. Bałczewski, J. Skalik
Charge life time in the time of flight measurements for aromatic hydrocarbons. Topical issue of fundamental and applied studies
International internet conference for young researchers and students, 27-28 stycznia 2015, Lutsk, Ukraina, 30-32
120. K. Kupczyńska, B. W. Michalski, M. Krzemińska-Pakuła, E. Szymczyk, Ł. Pęczek, P. Lipiec, J. D. Kasprzak
The role of myeloperoxidase and monocyte chemoattractant protein-1 in the improvement of left ventricular function after ST-segment elevation myocardial infarction. European Heart Journal. 2015; 36: (Meeting Abstract: P4448); 757-757
Notes: Congress of the European-Society-of Cardiology, 29 sierpnia – 02 września 2015, Londyn, Wielka Brytania
50 pkt.
121. S. Słomkowski, A. J. Domb, Special issue honoring Professor S. Penczek on his 80th birthday Preface, Polym Adv Technol. 2015; 26(7SI): 675-676
IF 1.757
30 pkt.

c.1. Artykuły naukowe w czasopismach, które ukazały się dotychczas tylko w wersji elektronicznej:

1. J. Chrzanowski, M. Rachwalski, A. M. Pieczonka, S. Leśniak, J. Drabowicz, P. Kielbasiński
Highly efficient chiral polydentate sulfinyl catalysts containing prolinol moiety
Tetrahedron (2015) DOI: 10.1016/j.tet.2015.05.103
IF 2.641
30 pkt.
2. P. Strzelczyk, G. D. Bujacz, P. Kielbasiński, J. Błaszczuk
Crystal and molecular structure of hexagonal form of lipase B from Candida antarctica
Acta Biochim. Polon. DOI: 10.18388/abp.2015_1065
15 pkt.
3. M. Dabrzalska, N. Benseny-Cases, R. Barnadas, S. Mignani, M. Zabłocka, J.-P. Majoral, M. Bryszewska, B. Klajnert-Maculewicz, J. Cladera
Fourier-transform Infrared Spectroscopy (FTIR) Characterization of the Interaction of Anti-Cancer Photosensitizers with Dendrimers
Anal. Bioanal. Chem. **408**(2), 535-544 (2015) DOI: 10.1007/s00216-015-9125-0
IF 3.436
40 pkt.
4. A. Wzorek, A. Sato, J. Drabowicz, V. A. Soloshonok, K. D. Klika
Remarkable magnitude of the self-disproportionation of enantiomers (SDE) via achiral chromatography; application to the practical-scale enantiopurification of β -amino acid esters
Amino Acids (2015) DOI: 10.1007/s00726-015-2152-5
IF 3.293
30 pkt.
5. D. Krasowska, A. Zając, W. Ciesielski, O. Michalski, D. Kulawik, M. Pyzalska, P. Pokora-Sobczak, T. Makowski, M. Janicka, B. Dudzinski, P. Wach-Panfilow
A stereogenic heteroatom-containing substituent as an inducer of chirality in the derivatives of thiophenes (mono, oligo and poly), fullerenes C60 and multiwalled nanotubes
Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem. (2015) DOI: 10.1080/10425607.2015.1079198
IF 0.561

15 pkt.

6. J. Drabowicz, F. Jordan, M. H. Kudzin, Z. H. Kudzin, C. V. Stevens, P. Urbaniak
Reactivity of Aminophosphonic Acids. Oxidative Dephosphonylation of 1-Aminoalkylphosphonic Acids by Aqueous Halogens
Dalton Trans. (2015) DOI: 10.1039/C5DT03083H
IF 4.197
40 pkt.
7. M. Koprowski, P. Bałczewski, K. Owsianik, E. Różycka-Sokołowska, B. Marciniak
Total synthesis of (±)-epithuriferic acid methyl ester via Diels-Alder reaction
Org. Biomol. Chem. (2015) DOI: 10.1039/c50602368h
IF 3.562
pkt. 35
8. J. Drabowicz, D. Krasowska, W. Ciesielski, D. Kulawik, M. Pyzalska, S. Zdanowska, B. Dudziński, P. Pokora-Sobczak, J. Chrzanowski, T. Makowski
Carbon nanotubes functionalized with sulfur, selenium or phosphorus or substituents containing these elements
Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem. (2015), DOI: 10.1080/10426507-2015-1100193
IF 0.561
15 pkt.
9. J. Śliwiak, R. Dolot, K. Michalska, K. Szpotkowski, G. Bujacz, M. Sikorski, M. Jaskolski
Crystallographic and CD probing of ligand-induced conformational changes in a plant PR-10 protein.
J. Struct. Biol. (2015) doi:10.1016/j.jsb.2015.11.008
IF 3.231
30 pkt.
10. T. Frączek, A. Paneth, R. Kamiński, A. Krakowiak, O. Paneth
Searching for novel scaffold of triazole non-nucleoside inhibitors of HIV-1 reverse transcriptase.
J. Enzyme Inhib. Med. Chem., **5**, 1-9 (2015)
IF 2.383
20 pkt.
11. R. Kaczmarek, S. Kaźmierski, T. Pawlak, E. Radzikowska, J. Baraniak
Assignment of the absolute configuration at stereogenic phosphorus atoms in P-diastereomers of dithymidyl-(N3'→P5')-phosphoramidothioate
Tetrahedron 2015, DOI:10.1016/j.tet.2015.12.041
IF 2.641
30 pkt.
12. A. Rozanski, A. Krajenta, R. Idczak, A. Galeski
Physical state of the amorphous phase of polypropylene-influence on free volume and cavitation phenomenon
Journal of Polymer Science, part B Polymer Physics, doi:10.1002/polb.23911
IF 3.830
30 pkt.
13. P. Pospiech, J. Chojnowski, U. Mizerska, T. Makowski, K. Strzelec, N. Sienkiewicz
Polysiloxane microspheres functionalized with imidazole groups as a palladium catalyst support
Applied Organometallic Chemistry, Manuscript ID AOC-15-0303.R2
IF 2.248
30 pkt.
14. Y. Nishiyama, M. Malon, M.J. Potrzebowski, P. Paluch, J.P. Amoureux
Accurate NMR determination of C-H or N-H distances for unlabeled molecules
Solid State Nucl Magn Reson. - DOI: 10.1016/j.ssnmr.2015.06.005
IF 2.266
30 pkt.

-----2016-----

15. J. Drabowicz, D. Krasowska, J. Chrzanowski, A. Zając
Chirality of Hypervalent Chalcogenuranes
Curr. Org. Chem., 20, 146-154 (2016) DOI: 10.2174/1385272819666150724233459
IF 2.157
30 pkt.
16. N. Sienkiewicz, K. Strzelec, P. Pospiech, M. Cypryk, T. Szmechtyk
New palladium catalyst immobilized on epoxy resins: synthesis, characterization and catalytic activity
Appl. Organomet. Chem. **30**, 4-11 (2016)
IF 2.248
30 pkt.
17. M. Grala, Z. Bartczak, A. Rozanski
Morphology, thermal and mechanical properties of polypropylene/SiO₂ nanocomposites obtained by reactive blending
Journal of Polymer Research, **25**, 1-19 (2016) doi:10.1007/s10965-015-0914-0
IF 1.920
25 pkt.
18. K. Skońska-Szary, A. Ramięga, W. Piaskowska, B. Janicki, M. Grala, P. Rieske, Z. Bartczak, S. Piaskowski
Synthesis and physicochemical characterization of chitin dihexanoate - a new biocompatible chitin derivative - in comparison to chitin dibutyrate',
Materials Sci. Eng.: C **60**, 489-502 (2016)
IF 3.088
30 pkt.
19. T. Makowski, M. Grala, W. Fortuniak, D. Kowalczyk, S. Brzezinski,
Electrical properties of hydrophobic polyester and woven fabrics with conducting 3D network of multiwall carbon nanotubes
Materials & Design, **90**, 1026-1033, (2016) doi:10.1016/j.matdes.2015.11.049
IF 3.501
35 pkt.
20. K. Piekarska, P. Sowinski, E. Piorkowska, Md.M.-Ul. Haque, M. Pracella
Structure and properties of hybrid PLA nanocomposites with inorganic nanofillers and cellulose fibers.
Composites: Part A- Appl. Sci. Manuf. **82**, 2016 (34-41)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.compositesa.2015.11.019>
IF 4.045
45 pkt.

c.2. Lista Struktur Zdeponowanych w PDB (Protein Data Bank):

brak

d. Referaty:

d.1. referaty - konferencje międzynarodowe:

1. J. Chrzanowski, D. Krasowska, S. Miroshnychenko, P. Pokora-Sobczak, G. Mielniczak, A. Zając, J. Drabowicz
Selected compounds containing sulfur or selenium as organocatalysts, ionic liquids, ligands and/or oxidation catalysts
3rd Workshop of the Multidisciplinary Group SES Redox & Catalysis – (WSES-3), 20-12 kwietnia 2015, Perugia, Włochy
2. D. Krasowska, S. Miroshnychenko, J. Chrzanowski, P. Pokora-Sobczak, W. Ciesielski, J. Drabowicz
Selected Compounds Containing a Stereogenic Heteroatom as Potential Ionic Liquids and/or Organocatalysts
11th International Conference on Heteroatom Chemistry, 14-19 czerwca 2015, Caen, Francja

3. M. Mikołajczyk
The field of prostanoid medicines revisited
Modern Synthetic Medicines: Problems and Prospects, 26-29 maja 2015, Kazań, Rosja
4. P. Kielbasiński, T. Cierpień, J. Łuczak, K. Wiktorska, L. Śliwka, Z. Chilmończyk
New fluorine derivatives of sulforaphane – synthesis and investigations of anticancer properties
7th International Meeting on Halogen Chemistry, HALCHEM VII, 3-6 września 2015, Częstochowa, Polska
5. A. Zając, J. Drabowicz
Achiral and chiral Derivatives of Hexafluorocumyl Alcohol Functionalized with Substituents Having the Diverse Valency Sulfur atom: Syntheses, Properties and Potential Applications
7th International Meeting on Halogen Chemistry, HALCHEM VII, 3-6 września 2015, Częstochowa, Polska
6. B. Nawrot
tRNA damage under oxidative stress; consequences of desulfuration of wobble 2-thiouridines
International Symposium on Bioorganic Chemistry, Pune, Indie, 10-15 stycznia 2015
7. A. Chworos
Synthetic RNA nanoparticles: their structure and function
Biomolecules and Nanostructures 5, Jarosław, 13-18 maja 2015
8. A. Chworos, R. Pawłowska
Localization of conjugated oligoelectrolytes (COEs) in cell membranes
ESMI /SoftComp annual meeting 2015, Ancona, Włochy, 8-12 czerwca 2015
9. A. Duda, M. Socka, T. Biela, M. Brzeziński
Polymerization of Lactides - from Fundamental Studies to Block Copolymers and Stereocomplexes, IUPAC International Conference on Advanced Polymers via Macromolecular Engineering 2015 (APME 2015), 18-22 października 2015, Yokohama, Japonia (referat sekcyjny na zaproszenie organizatorów).
10. T. Biela, M. Brzeziński,
Supramolecular Poly lactide as a Result of Noncovalent Interactions,
4th EPNOE International Polysaccharide Conference Polysaccharides And Polysaccharide-Based Advanced Materials: From Science To Industry, 19-22 października 2015, National Stadium, Warszawa, Polska
11. S. Slomkowski, T. Basińska, M. Gosecka
Polymer Colloidal Crystals and Related Materials
2nd Workshop on Progress in Bio- and Nanotechnology, BioNanoWorkshop, 28-29.09.2015, Łódź, Poland, Book of Abstracts, str.22
12. S. Slomkowski, M. Gosecki, M. Gadzinowski
Polyester, Polyether, Polyester-Polyether, and Polycarbonate Nano- and Microparticulate Carriers - Progress in Synthesis, Preparation and Applications
EMRS Spring Meeting, Symposium X, 11-15 maja, 2015, Lille, Francja
13. S. Slomkowski, W. Fortuniak, J. Chojnowski, A. Nyczyk, P. Pospiech, U. Mizerska
Pre-ceramic polysiloxane microspheres and their ceramized derivatives with controlled porosity and SiOH group content
EPF Congress, Drezno, 21-26 czerwca 2015, Book of Abstracts, str. 98, NANO-L-22
14. S. Slomkowski, W. Fortuniak, J. Chojnowski, A. Nyczyk-Malinowska, P. Pospiech, U. Mizerska
Silicon oxycarbide microspheres from polysiloxanes and their ceramic derivatives
13th International Conference of Polymers for Advanced Technology (PAT2015), June 25-28 czerwca 2015, Hangzhou, Chiny
15. A. Kowalewska, M. Nowacka, T. Makowski
Superhydrophilic, Chemospecific and Micropatterned Surfaces by Self-Assembly of Linear Oligosilsesquioxanes

ISPO 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja

16. M. Nowacka, A. Kowalewska
Pyrene labelled silsesquioxanes and their chemosensing properties. ISPO 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja
17. W. Stańczyk, T. Ganicz, K. Gradzińska, A. Kowalewska, J. Kurjata, K. Różga-Wijas
POSS- anthracycline composites
10-th International Workshop on Silicon-Based Polymers, 26-30 kwietnia 2015, Aussois, Francja
18. A. Pawlak
Disentangled Polymers and All-Polymer Composites,
The 3rd CEEP Workshop on Polymer Sciences, 23-26 września 2015, Iasi, Rumunia
19. A. Galeski
Plastics functionality by modern processing.
6th INNOVATIONS FORUM: PLASTICS IN HARMONY WITH NATURE, 17-19 czerwca 2015, Rzeszów, Polska
20. A. Galeski, S. Galeski, E. Piorkowska, K. Jurczuk, G. Regnier, A. Rozanski
Crystallization and melting phenomena in nanofiber-reinforced polymer nanocomposites.
23rd World Forum on Advanced Materials Polychar-23, Lincoln, 11- 15 maja 2015, Nebraska, USA
21. M. J. Potrzebowski (*invited Speaker*)
NMR crystallography
Magnetic Moments in Central Europe
25 luty - 1 marca 2015, Krynica-Zdrój, Polska
22. M. J. Potrzebowski (*invited Speaker*)
Mesoporous Silica Nanoparticles as a Drug Delivery Systems - Solid State NMR Studies
XLIV National Congress on Magnetic Resonance
28-30 września 2015, Rzym, Włochy
23. M. J. Potrzebowski (*invited Speaker*)
Some applications of NMR crystallography in materials and pharmaceutical sciences
BRSG (British Radiofrequency Spectroscopy Group) Christmas Meeting 2015: NMR & Crystallography
14 grudnia 2015, Londyn, Wielka Brytania

d.2. referaty - konferencje krajowe:

1. M. Döchler
Exosomes in cancer diagnosis and therapy
I Ogólnopolska Konferencja Doktorantów Nauk o Życiu – BioOpen, 20-22 kwietnia 2015, Uniwersytet Łódzki
2. M. Cypryk
Polisiloksany jako nośniki katalizatorów
XXIII Ogólnopolskie Seminarium „Postęp w Chemii, Fizyce i Technologii Polimerów”
Łódź, 21 maja 2015
3. M. Cypryk
Polisiloksany jako nośniki katalizatorów
Zjazd PTChem Gdańsk, 21-24 września 2015, Streszczenia, S04WS06
4. R. Szymański, S. Sosnowski
Modelowanie kinetyki procesu polimeryzacyjnego jako narzędzie badania mechanizmu polimeryzacji oraz przewidywania jej przebiegu
Zjazd PTChem Gdańsk, 21-24 września 2015, Streszczenia, S04WS07

5. T. Biela, M. Brzeziński,
Supramolekularne polilaktydy. Metody otrzymywania i wybrane właściwości,
58. Zjazd Naukowy PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk (wykład sekcyjny na zaproszenie organizatorów)
6. T. Basińska, M. Gosecka, M. Gadzinowski, M. Gosecki, S. Słomkowski
Nano- i mikrocząstki polimerowe jako uniwersalne nośniki biocząsteczek.
Ogólnopolska konferencja naukowa „Mikrobiologia w Medycynie, Przemysle i Ochronie Środowiska”
Łódź, 24-25 października 2015 r., Materiały, 10-III, str. 100
7. T. Basińska, M. Gosecka, S. Słomkowski
Materiały polimerowe zawierające poliglicydol – otrzymywanie, właściwości, zastosowania biomedyczne
58 Zjazd Naukowy PTChem, Gdańsk, 21-25 września 2015, Materiały Zjazdowe, cz.1. Streszczenia, str.166, S04WS02
8. S. Słomkowski, U. Mizerska, W. Fortuniak, P. Pospiech, J. Chojnowski
Adsorpcja gamma-globulin na sfunkcjonalizowanych mikrosferach polisiloksanowych
58 Zjazd PTChem, Gdańsk, 21-25 wrzesnia 2015, Materiały zjazdowe, S04WS04, str. 167
9. S. Słomkowski, W. Fortuniak, P. Pospiech, U. Mizerska, J. Chojnowski
Polysiloxane and silicon oxycarbide microspheres - Potential materials for positron annihilation studies (wykład na zaproszenie organizatorów)
42nd Polish Seminar on Positron Annihilation, Lublin, 29 czerwca – 1 lipca 2015
10. M. J. Potrzebowski (*invited Speaker*)
Analiza procesów dynamicznych w krystalicznych białkach z wykorzystaniem spektroskopii NMR w cieple stałym i metod obliczeniowych
IV Konferencja: „Związki biologicznie czynne: aktywność, struktura, synteza”, Białystok
12-14 czerwca 2015

d.3. wykłady i referaty wygłoszone za granicą – na zaproszenie instytucji naukowych – niebędące referatami czy wykładami w trakcie konferencji ani działalnością dydaktyczną

1. J. Drabowicz
Heteroatom-containing compounds as reagents in organic synthesis
University of Perugia, Italy
2. B. Nawrot
The tRNA damage under oxidative stress: Consequences of desulfuration of 2-thiouridine at the “wobble” position
Department of Medicinal Chemistry and Pharmacognosy, The University of Illinois at Chicago, USA,
11 czerwca 2015
3. B. Nawrot
The tRNA damage under oxidative stress: Consequences of desulfuration of 2-thiouridine at the “wobble” position
The University of Texas, Health Science Center at Houston, USA, 24 czerwca 2015
4. A. Galeski, K. Jurczuk, A. Pawlak, G. Regnier, E. Piorkowska
Crystallization and melting phenomena in nanofiber reinforced polymer nanocomposites.
Case Western Reserve University, 8-23 maja 2015
5. E. Piorkowska, P. Sowinski, S. A. E. Boyer, J.-M. Haudin
The role of nucleating agents in high pressure-induced gamma crystallization in isotactic polypropylene,
Case Western University, Department of Macromolecular Science and Engineering,
Center for Layered Polymeric Systems, Cleveland, OH, USA, 20 maja 2015

d.4. wykłady na zaproszenie instytucji krajowych – niebędące referatami czy wykładami w trakcie konferencji ani działalnością dydaktyczną

1. B. Nawrot
Biotechnologia w CBMiM PAN
Prezydium Komitetu Biotechnologii, 21 października 2015
2. M. Döchler
Tumor-derived exosomes and their interaction with the host immune system
Instytut Chemii Bioorganicznej PAN, Poznań, 27 maja 2015
3. M. Cypryk,
Od nano do makro. O współczesnej chemii
Łódzki Uniwersytet Trzeciego Wieku, Łódź, 6 maja 2015
4. P. Uznański
Synteza, własności i funkcjonalizacja nanocząstek metali szlachetnych, NANOSemTech, czerwiec 2015, Politechnika Łódzka
5. E. Piórkowska
Postępy w zrozumieniu procesów krystalizacji polimerów.
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica, Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki, Kraków, 19 czerwca 2015

e. Komunikaty:

e.1. komunikaty - konferencje międzynarodowe:

1. A. Rzewnicka, M. Cypryk, J. Krysiak, W. H. Midura,
Chiral Cyclopropylphosphonates – problems with phosphoryl group migration
11th International Conference on Heteroatom Chemistry, Caen, 14-19 czerwca 2015, CO9 – 85
2. M. Döchler
Exosome-transported miRNAs contribute to cancer immunosuppression
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
3. P. Guga
180° Turn - hompurine P-stereodefined PS-DNAs form stable parallel complexes with Hoogsteen paired nucleic acids existing in the A conformation
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
4. K. Jastrzębska, P. Guga
Complexes of P-stereodefined PS-DNA/LNA oligomers with complementary DNA and RNA templates
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
5. A. Chwiałkowska, E. Sochacka, B. Nawrot
Structural changes of 2-thiouridine under oxidative stress conditions – unexpected role of cytochrome c
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
6. A. Chworos, D. Jedrzejczyk, R. Pawłowska
RNA architectonics for gene expression regulation
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
7. D. Jedrzejczyk, A. Chworos
Structuralized RNA Nanoparticles for GFP Gene Expression Silencing
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź

8. M. Döchler, Ł. Pęczek, L. Czernek
Exosome-transported miRNAs contribute to cancer immunosuppression
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
9. L. Czernek, A. Chworos, M. Döchler
Influence of the differentiation status of immune cells on exosome uptake
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
10. B. Nawrot
Sulfur-modified nucleic acids as tools in biological and medicinal chemistry
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
11. K. Królewska, M. J. Cieślak, B. Kuran, M. Napiórkowska, J. Kossakowski, I. Wybrańska, B. Nawrot
Novel benzofurane and dicarboximide derivatives highly toxic towards selected leukemic cells activate apoptosis via receptor and mitochondrial pathways and upregulate the expression of several proapoptotic genes
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
12. M. Bednarek, M. Basko, E. Wojtczak, T. Biedron, P. Kubisa
Synthesis of polylactides capable of interaction with biologically active compounds by cationic ring-opening polymerization
11th International Conference on Advanced Polymers via Macromolecular Engineering (APME 2015), Jokohama, Japonia, 18-22 października 2015
13. A. Pawlak, J. Krajenta, A. Galeski
Polymer composites with polypropylene nanofibers formed in-situ by deformation in solid state
European Polymer Congress 2015, 21-26 czerwca 2015, Drezno, Niemcy
14. K. Jurczuk, M. Wojtczak, A. Gałęski,
Fibrillar nanocomposites
POLYCHAR 23 World Forum on Advanced Materials, 11-15 maja 2015, Lincoln, Nebraska, USA
15. A. Gałęski, S. Gałęski, E. Piorkowska, K. Jurczuk, G. Regnier, A. Rozanski,
Crystallization and melting phenomena in nanofiber reinforced polymer nanocomposites
POLYCHAR 23 World Forum on Advanced Materials, 11-15 maja 2015, Lincoln, Nebraska, USA
16. P. Sowinski, E. Piorkowska, S. A. E. Boyer, J. M. Haudin:
Nucleation of high pressure gamma form in isotactic polypropylene in nonisothermal conditions.
23rd World Forum on Advanced Materials Polychar-23, 11-15 maja 2015, Lincoln, Nebraska, USA
17. J. M. Haudin, P. Sowinski, S. A. E. Boyer, E. Piorkowska
Nucleation oh high-pressure-induced gamma form in isotactic polypropylene in nonisothermal conditions
31st International Conference of Polymer Processing Society (PPS-31), 07-11 czerwca 2015, Czedżu, Korea,
18. S.A.E. Boyer, P. Sowinski, E. Piorkowska, J.-M Haudin,
The gamma-nucleation in polypropylene under high-pressure: thermal analysis as a support in the understanding.
The 51st Japanese Conference of Calorimetry and Thermal Analysis (JSCTA 2015), 08-10 października 2015, Saitama, Japan
19. M. Pluta, E. Piorkowska
Modyfikacja ciągliwości i właściwości barierowych polilaktydu blokowymi kopolimerami na bazie glikolu propylenowego
XV Międzynarodowa Konferencja Naukowo-Techniczna, Polimery i Kompozyty Konstrukcyjne, 12-15 maja 2015, Istebna, Polska

20. P. Paluch
2D and 3D CP-VC as tools for dynamics study
Magnetic Moments in Central Europe Krynica-Zdrój
25 luty - 1 marca 2015, Krynica-Zdrój, Polska

e.2. komunikaty - konferencje krajowe:

1. J. Milczarek, R. Pawłowska, A. Chworoś, B. Łukasik, R. Żurawiński
Conjugated Oligoelectrolytes as a Fluorescent Probes
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź, Komunikat K-36
2. B. Łukasik; W. Perlikowska, R. Żurawiński, M. Mikołajczyk
Nowa metoda syntezy enancjomerycznie czystych stereoizomerów rosaprostolu
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk, S03KS25
3. P. Pokora-Sobczak, J. Drabowicz, J. Chrzanowski, D. Krasowska, G. Mielniczak, A. Zając
Zastosowanie optycznie czynnych kwasów t-butyloarylotiofosfinowych jako potencjalnych chiralnych odczynników solwujących w spektroskopii NMR
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk
4. E. Kowalska, P. Bałczewski
Badania nowej elektrofilowej reakcji cyklizacji pochodnych diarylometanoli oraz pochodnych diarylometanów po raz pierwszy wspomaganiej ultradźwiękami wysokiej mocy w warunkach wodnych
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), 16-18 kwietnia 2015 roku, Łódź
5. P. Bałczewski, E. Kowalska, J. Skalik, A. Bodzioch, M. Koprowski
Nowe reakcje cyklizacji pochodnych diarylometanoli i diarylometanotiol
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO-X), 16-18 kwietnia 2015 roku, Łódź
6. D. Jędrzejczyk, A. Chworoś
The Synthesis of RNA Nanoparticles for Gene Expression Regulation
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), 16-18 kwietnia 2015, Łódź
7. J. Milczarek, R. Pawłowska, B. Łukasik, R. Żurawiński, A. Chworoś
Conjugated Oligoelectrolytes as a Fluorescent Probes
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), 16-18 kwietnia 2015, Łódź
8. J. Milczarek
Skoniugowane oligoelektrolity jako znaczniki fluorescencyjne
Sesja doktorantów CBMiM, 08 czerwca 2015, Łódź
9. D. Jędrzejczyk
Zastosowanie ustrukturalizowanych nanocząstek RNA do badania regulacji ekspresji genów
Kuchnia Młodych Talentów Akademii Młodych Uczonych PAN, 27 czerwca 2015, Emów
10. A. Chwiałkowska
Niezwykłe latarnie życia
Panel Wiedzy, 21 lipca 2015, Łódź
11. D. Jędrzejczyk
Poskromić niesforne białka
Panel Wiedzy, 21 lipca 2015, Łódź
12. B. Gostyński, M. Cypryk
Modelowanie molekularne silseskwioxanów i ich oddziaływań z jonami
Seminarium Doktorantów CBMiM PAN, 8 czerwca 2015
13. M. Baśko, M. Bednarek
Zastosowanie kationowej polimeryzacji według mechanizmu Aktywowanego Monomeru do syntezy sfunkcjonalizowanych oligoestrów
58 Zjazd Naukowy PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk, S04KS11

14. M. Nowacka*, A. Kowalewska, T. Makowski
Drabinkowe silseskwioksany – polimery do zadań specjalnych
58 Zjazd PTChem i SITPCChem, 21-25 września 2015, Gdańsk
15. K. Gradzińska, W. A. Stańczyk, E. Radzikowska, M. Florczak, E. Wielgus
Nowe nanokompozyty doksorubicyny z POSS
58 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego w Gdańsku, 21-25 września 2015
16. A. Rozanski, A. Krajenta
Modyfikacja fazy amorficznej polipropylenu-wpływ na wybrane właściwości termo-mechaniczne
XXII Konferencja Naukowa Modyfikacja Polimerów, 21-23 września 2015, Kudowa-Zdrój
17. A. Krajenta, A. Różański
Wpływ modyfikacji fazy amorficznej polimerów częściowo krystalicznych na wybrane właściwości fizyczne
58 TChem, 21-25 września 2015, Gdańsk
18. P. Sowinski, E. Piorkowska, J.-M. Haudin, S.A.E. Boyer,
High pressure crystalization of isotactic polypropylene in nonisothermal conditions.
V Wyjazdowa Sesja Naukowa Doktorantów Politechniki Łódzkiej, 09-12 kwietnia 2015, Rogów
19. P. Sowinski, E. Piorkowska, S.A.E. Boyer, J-M. Haudin:
Krystalizacja wysokociśnieniowa izotaktycznego polipropylenu
VI Sesja Magistrantów i Doktorantów Łódzkiego Środowiska Chemików, 11 czerwca 2015, Łódź
20. P. Sowinski, S.A.E. Boyer, J-M. Haudin, E. Piorkowska:
Wysokociśnieniowa krystalizacja polipropylenu zarodkowana pochodną sorbitolu
II Warsztaty Przedsiębiorczości Akademickiej, 6–9 lipca 2015, Uniejów
21. P. Sowiński, E. Piórkowska
Zarodkowanie wysokociśnieniowej formy gamma izotaktycznego polipropylenu przez pochodną sorbitolu
Konferencja Mała Wielka Nauka, 10-11 grudnia 2015, Łódź
22. S. Kaźmierski
DOSY - „chromatografia” w rurce NMR
IV Konferencja: „Związki biologicznie czynne: aktywność, struktura, synteza”, 12-14 czerwca 2015, Białystok
23. A. Jeziorna, K. Stopczyk, E. Skorupska, M. J. Potrzebowski
Cykliczne Dipeptydy jako jednostki budulcowe nano- i mikrosystemów
IV Konferencja: „Związki biologicznie czynne: aktywność, struktura, synteza”, 12-14 czerwca 2015, Białystok
24. E. Skorupska, A. Jeziorna, E. Wielgus, M.J. Potrzebowski
Metodologia badań farmakologicznie czynnych kokryształów umieszczonych w mezoporowatej nanokrzemionce z wykorzystaniem spektroskopii NMR w ciele stałym
IV Konferencja: „Związki biologicznie czynne: aktywność, struktura, synteza”, 12-14 czerwca 2015, Białystok
25. E. Skorupska, A. Jeziorna, E. Wielgus, M. Potrzebowski
Nowa metoda enkapsulacji składników farmakologicznie czynnych w mezoporowatej nanokrzemionce. Badania z wykorzystaniem spektroskopii NMR w ciele stałym
58 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk
26. E. Skorupska, M.J. Potrzebowski
Solid State NMR Studies of Pharmaceutical cocrystals embedded in mesoporous silica nanoparticles materials
V Wyjazdowa Sesja Naukowa Doktorantów Politechniki Łódzkiej, 09-12 kwietnia 2015, Rogów
27. E. Skorupska, M. J.Potrzebowski
Metodologia badań farmakologicznie czynnych kokryształów umieszczonych w mezoporowatej nanokrzemionce z wykorzystaniem spektroskopii NMR w ciele stałym

Warsztaty Przedsiębiorczości Akademickiej, 6-9 lipca 2015, Uniejów

28. P. Paluch
Rozwój i implementacja metod spektroskopii NMR w ciele stałym z wykorzystaniem bardzo szybkiego wirowania próbek pod kątem magicznym
Minisymposium sekcji NMR Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 20 listopada 2015, Warszawa
29. T. Pawlak
Zastosowanie spektroskopii NMR w ciele stałym i metod obliczeniowych w badaniach nieuporządkowania molekularnego w kryształach peptydów i polimerów syntetycznych
Minisymposium sekcji NMR Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 20 listopada 2015, Warszawa
30. B. Miksa
Kumarynowe nanokapsułki z odwracalnie sieciowaną i fluorescencyjną powłoką polimerową przeznaczone do transportu leków i diagnostyki medycznej
58 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk

f. Postery:

f.1. postery - konferencje międzynarodowe

1. T. Cierpień, P. Kielbasiński, J. Łuczak, K. Wiktorska, Z. Chilmończyk, L. Śliwka
Fluorinated isoselenocyanate analogs of sulforaphane – synthesis and biological activity
11th International Conference on Heteroatom Chemistry, 14-19 czerwca 2015, Caen, Francja,
Poster no. 129
2. T. Cierpień, P. Kielbasiński, J. Łuczak, K. Wiktorska, Z. Chilmończyk, L. Śliwka
Fluorinated isoselenocyanate analogs of sulforaphane
7th International Meeting on Halogen Chemistry, HALCHEM VII, 3-6 września 2015, Częstochowa,
P-14
3. P. Strzelczyk, G.D. Bujacz, P. Kielbasiński, J. Błaszczak
Hexagonal form of lipase CAL-B
7th International Meeting on Halogen Chemistry, HALCHEM VII, 3-6 września, Częstochowa, 2015,
P-18
4. B. Łukasik, W. Perlikowska, R. Żurawiński, M. Mikołajczyk
Synthesis of Enantiomerically Pure Stereomers of Rosaprostol
XVIII International Symposium „Advances in The Chemistry of Heteroorganic Compounds”,
20 listopada, Łódź, 2015, Abstract-099
5. J. Chrzanowski, D. Krasowska, M. Urbaniak, J. Drabowicz
Palladium(0) catalyzed C-P cross-coupling reaction of optically pure secondary phosphine oxides with haloanilines as a route to key substrates in the synthesis of the chiral, second-generation Grubbs catalysts
18th Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis (OMCOS18) (Sitges-Barcelona,
28 06 – 02 lipca 2015, Barcelona, Hiszpania, P-330
6. D. Krasowska, J. Chrzanowski, M. Urbaniak, J. Drabowicz
P-Chiral α -aminoalkyl phosphine oxides
11th International Conference on Heteroatom Chemistry (ICHAC-XI), 14-19 czerwca 2015, Caen,
Francja
7. A. Zając, P. Pokora-Sobczak, G. Mielniczak, B. Bujnicki, Z. Czarnocki, J. Chrzanowski,
J. Drabowicz
Some optically active fluorinated organic compounds as chiral solvating agents (CSA)
7th International Meeting on Halogen Chemistry (HALCHEM 7), 3-6 września 2015, Częstochowa,
P-10
8. A. Zając, L. Sieroń, J. Drabowicz
The unexpected formation of chiral spiro system in the reaction of an ortho-lithio lithium cumyl alkoxide with N-(t-butylsulfonyl)phthalimide: experiments on the generality of the process

7th International Meeting on Halogen Chemistry (HALCHEM 7), 3-6 września 2015, Częstochowa, P-11

9. B. Bujnicki, J. Drabowicz, M. Mikołajczyk, M. Cypryk
Dialkoxysulfonium salts. Synthesis, hydrolysis and sulfurane structure(s) formation
XVIII International Symposium "Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds", 20 listopada 2015, Łódź
10. B. Dudziński, D. Kulawik, S. Zdanowska, J. Chrzanowski, S. Miroshnychenko, W. Ciesielski, P. Pokora-Sobczak, J. Drabowicz
Supramolecular complexes of carbon nanotubes with compounds containing a stereogenic heteroatom
11th International Conference on Heteroatom Chemistry, 14-19 czerwca 2015, Caen, Francja, poster 59, pp.171
11. E. Kowalska, P. Bałczewski
Thio-modification of the New Friedel-Crafts Type Cyclization in Synthesis of RS-substituted (Hetero)anthracenes
ICHAC-XI, International Conference on Heteroatom Chemistry, 14-19 czerwca 2015, Caen, Francja
12. J. Kuliński, S. Kania, P. Bałczewski, J. Skalik
Charge lifetime in the time of flight measurements for aromatic hydrocarbons
International Internet Conference for Young Researchers and Students, TOPICAL ISSUES OF FUNDAMENTAL AND APPLIED STUDIES, 27-28 stycznia 2015, Łuck, Ukraina
13. J. Skalik, P. Bałczewski
Application of Aromatic Dialdehydes in Synthesis of New Heteroatom Containing Polyacenes
11th International Conference on Heteroatom Chemistry, 14-19 czerwca 2015, Caen, Francja
14. M. Markiton, K. Ozga, E. Rozycka-Sokolowska, B. Marciniak, P. Bałczewski, J. Skalik, I. V. Kityk
Fundamental issues of creation of new nanomaterials and nanotechnologies, "Optically induced non-linear optical phenomena in novel 10-(benzyloxy)-3-bromo-6,8-dimethoxyanthracene-2-carbaldehyde"
3rd International research and practice conference NANOTECHNOLOGY and NANOMATERIALS NANO-2015 26-29 sierpnia 2015, Lwowski Uniwersytet Narodowy im. Iwana Franki, Lwów, Ukraina
15. M. Koprowski, P. Bałczewski
The Synthesis of Phosphononaphthalenes via Diels-Alder Reaction
19th European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 2015); 12-16 lipca 2015, Lizbona, Portugalia
16. J. Błaszczak
Ribonuclease III: The enzyme with its Crystal structure solved after three decades
International Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15 października 2015, Łódź, P4.
17. K. Owsianik, E. Krawczyk, G. Mielniczak, L. Sieroń
Stereoselective reduction of cyclic α -hydroxy oximes as convenient route to chiral cis-1,2-amino alcohols
XVIII INTERNATIONAL SYMPOSIUM „Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds”, 20 listopada 2015, Łódź
18. A. Stasiak, A. Bodzioch, E. Kowalska, K. Owsianik, J. Skalik, P. Bałczewski
Thiomodification of the Bradsher reaction
XVIII INTERNATIONAL SYMPOSIUM „Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds”, 20 listopada 2015, Łódź
19. A. Chworos
Regulation of GFP Expression in Cells by RNA Multicomponent Particles
Gordon Research Conference, RNA Nanotechnology, 1-6 lutego 2015, Ventura, USA
20. M. Düchler, L. Peczek, K. Zuk, P. Pluta, I. Zalesna, D. Nejc, A. Jeziorski, M. Szubert, J. Suzin, M. Czyz

Comparison of the immunosuppressive microenvironment in human breast cancer, melanoma and ovarian cancer

Cancer, Inflammation and Immunity, 14 - 16 czerwca 2015, Sitges, Hiszpania

21. A. Krakowiak, D. Piotrkowska, Ł. Pęczek
Comparison of the expression and functionality of P2X7 receptors sensitive to ATP and Bz-ATP activation at different cell lines
40th FEBS Congress, 4-9 lipca 2015, Berlin, Niemcy
22. K. Kupczynska, B.W. Michalski, M. Krzeminska-Pakula, E. Szymczyk, L. Peczek, P. Lipiec, J. D. Kasprzak
The role of myeloperoxidase and monocyte chemoattractant protein-1 in the improvement of left ventricular function after ST-segment elevation myocardial infarction
Congress of the European-Society-of-Cardiology (ESC), 29.08.-02 września 2015, Londyn, Anglia,
23. A. Chwialkowska, E. Sochacka, B. Nawrot
Studies on desulfuration of 2-thiouridine induced by hydrogen peroxide in the presence of cytochrome c
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
24. R. Kaczmarek, D. Korczyński, E. Radzikowska, J. Baraniak
Synthesis of modified analogues of dinucleoside polyphosphates
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
25. D. Piotrkowska, A. Krakowiak
Acid Therapeutics expression and function of the P2X7 receptor on human cell lines
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
26. M. Sierant, M. Rozanski, B. Nawrot
Overexpression and preliminary characterization of tRNA 2-selenouridine synthase (SelU) from Escherichia coli
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
27. E. Radzikowska, R. Kaczmarek, D. Korczyński, J. Baraniak
The oxathiophospholane approach to the synthesis of stereoregular oligo(nucleoside-(N3'→P5')-phosphoramidothioate)s
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
28. A. Sęda, R. M. Dolot, B. Nawrot
Hint3 – Mysterious protein. Studies on overexpression and purification
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
29. G. Leszczynska, R. Bomba, A. Gorska, B. Nawrot, E. Sochacka
Synthesis of S-geranylated RNA fragment by the site specific incorporation of 2-geranylthiouridine phosphoramidite
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
30. P. Bartos, B. Nawrot, E. Sochacka
Desulfuration of 5-substituted 2-thiouridines under model oxidative stress conditions
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
31. A. Krakowiak, B. Kocoń-Rębowska
Detection of the Fhit protein complex with phosphorothioate analogs of Ap4A by photocrosslink
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
32. J. Milczarek, R. Pawlowska, A. Chworos
Fluorescent molecules with phenylenevinylene core
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź
33. K. Jastrzębska, P. Guga
Thermodynamic properties of complexes formed by P-stereodefined PS-DNA/LNA chimeras with complementary DNA and RNA templates
Symposium on Recent Advances in Nucleic Acids Therapeutics, 15-16 października 2015, Łódź

34. P. M. Zagórski, P. Tokarz, B. Gostyński, E. Obijalska, J. Lewkowski, M. W. Płotka, S. Domagała
The simplest polyfluoroalkylphosphonates and their non trivial synthesis
XVIII Międzynarodowe Sympozjum „Postępy w Chemii Związków Heteroorganicznych”,
20 listopada 2015, Łódź
35. G. Lapienis, E. Piorkowska, J. Bojda, M. Cichorek
Comparison of properties of star and linear poly(L-lactide)
23rd World Forum on Advanced Materials Polychar-23, 11-15 maja 2015, Lincoln, Nebraska, USA,
36. A. Lewandowska, M. Brzeziński, T. Biela, A. Duda, A. Michalski
Poly(lactide) Stereocomplexes with Various Architectures as Useful Materials to Drug Delivery Systems
P2M Summer School, 26-29 maja 2015, Lacanau, Francja
37. T. Basinska, E. Lewandowska, M. Gosecka, S. Slomkowski
Poly(styrene/ α -tert-butoxy- ω -vinylbenzylpolyglycidol) ellipsoidal particles: preparation, characterization and adsorption on solid supports
EPF Congress, 21-26 czerwca 2015, Drezno, Niemcy
Book of Abstracts, str.126, NANO-P-064
38. M. Gosecka, M. Gosecki, J. Bojda
Polyglycidol interactions with diboronic acid
P2M Meeting on Precision Polymer Materials, 26-29 maja 2015, Lacanau, Francja
39. A. Kowalewska*, M. Nowacka, T. Makowski
Superhydrophilic surfaces by self-assembly of linear oligosilsesquioxanes.
4th International Conference on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, 9-13 marca 2015, Sitges, Hiszpania
40. M. Nowacka*, A. Kowalewska, T. Makowski
New method for preparation of ladder like silsesquioxanes bearing phenyl groups
ISPO 2015 Aussois, Francja
41. M. Nowacka*, A. Kowalewska, W. Maniukiewicz
Octahedral octakis(3-mercaptopropyl)octasilsesquioxane.
ISPO 2015, 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja
42. M. Nowacka*, A. Kowalewska, T. Makowski
Patterned surfaces from functionalized ladder like silsesquioxanes., ECOF14, 29 czerwca - 2 lipca 2015, Genua, Włochy
43. P. Pospiech
Polysiloxanes microspheres as catalyst support
17th International Symposium on Relations Between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis ISHHC17, 12-15 lipca 2015, Utrecht, Holandia, Poster P149
44. J. Kurjata, K. Różga-Wijas, W. Stańczyk
Efficient way of synthesis of alkoxysilanes and their application as material for modification soil. Study of hydrolysis and condensation of methyltriethoxysilane in aqueous systems
10th International Workshop on Silicon-based materials, 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja
45. J. Kurjata, K. Różga-Wijas, W. Stańczyk
Hydride transfer ring-opening polymerization of 2,4,6,8-tetramethylcyclotetrasiloxane (DH4) and polycondensation of DH4 with tetramethoxysilane (TMOS)
10th International Workshop on Silicon-based materials, 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja
46. W. A. Stańczyk, K. Różga-Wijas, J. Kurjata
Synthesis and characterization of doxorubicin-functionalized silsesquioxane
10th International Workshop on Silicon-based materials, 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja
47. K. Gradzińska, A. Kowalewska, P. Sowiński
Functionalized core-shell PS-POSS microcapsules and microspheres with diverse structure of their silica walls

- 10th International Workshop on Silicon-based materials, 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja
48. A. Janaszewska, K. Gradzińska, B. Klajnert-Maculewicz, W. A. Stańczyk
Silsesquioxanes – known nanoparticles, rediscovered as drug delivery systems
10th International Workshop on Silicon-based materials, 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja
 49. K. Gradzińska, W. Stańczyk, A. Kowalewska
Spectroscopic studies of novel POSS derivatives
10th International Workshop on Silicon-based materials, 26-30 kwiecień 2015, Aussois, Francja
 50. E. Z. Frątczak, P. Uznański, M. Moneta
Molecular organization in pentacene thin films on SiO₂ characterized by IR spectroscopy, spectroscopic ellipsometry, and AFM microscopy
3rd ICSOS workshop on surface structures, 19–26 lipca 2015, Łódź
 51. J. Krajenta, A. Pawlak
Crystallization of Polypropylene From Partially Disentangled Melt
The 3rd CEEP Workshop on Polymer Sciences, 23-26 września 2015, Iasi, Rumunia
 52. K. Gradzińska, A. Kowalewska, P. Sowinski
Preparation of functionalized core-shell PS-POSS microcapsules and microspheres with diverse structure of the silica walls.
10th International Workshop on Silicon-Based Polymers, 26-30 kwietnia 2015, Aussois, Francja
 53. S. A. E. Boyer, M. Gerland, E. Piorkowska
Control of nano-fillers orientation in a polymer composite from purely thermo-mechanical loading
Frontiers in Polymer Science, 20-22 maja 2015, Riva Del Garda, Włochy
 54. S. A. E. Boyer, P. Sowinski, E. Piorkowska, J.-M. Haudin
Nucleation of high pressure gamma form in isotactic polypropylene: key signature in nonisothermal crystallization
Conference on Polymer processing with resulting morphology and properties: feet in the present and eyes at the future, October 17-21 października 2015, Salerno, Włochy
 55. P. Paluch, T. Pawlak, A. Jeziorna, J. Trébosc, G. Hou, A. J. Vega, J.-P. Amoureux, M. Dracinsky, T. Polenova, M. J. Potrzebowski
Analysis of Local Molecular Motions of Aromatic Sidechains in Proteins by 2D and 3D Fast MAS NMR Spectroscopy and Quantum Mechanical Calculation
9th Alpine Conference on Solid State NMR, 13 -17 września 2015, Chamonix, Francja
 56. P. Paluch, J. Trébosc, Y. Nishiyama, M.J. Potrzebowski, M. Malon, J.-P. Amoureux
Theoretical study of CP-VC: A simple, robust and accurate MAS NMR method for analysis of dipolar coupling.
9th Alpine Conference on Solid State NMR, 13-17 września 2015, Chamonix, Francja
 57. A. Jeziorna, K. Stopczyk, E. Skorupska, M. J. Potrzebowski
Solid state NMR studies of self-assembled systems based on cyclic dipeptides
9th Alpine Conference on Solid State NMR, 13 -17 września 2015, Chamonix, Francja
 58. E. Skorupska, P. Paluch, A. Jeziorna, M. J. Potrzebowski
Mesoporous Silica Nanoparticles as a Drug Delivery Systems - Solid State NMR Studies
9th Alpine Conference on Solid State NMR, 13-17 września 2015, Chamonix, Francja
 59. W. Dąbkowski
Phosphorfluoridites: unprecedented efficient intermediated in the synthesis of tricoordinate phosphorus compounds holding P-C linkage
18th International Symposium „Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds”, 20 listopada 2015, Łódź
 60. K. Piórecka, W. A. Stańczyk, E. Radzikowska, M. Florczak, E. Wielgus
Spectroscopic studies of novel doxorubicin/daunorubicin derivatives

f.2. postery - konferencje krajowe

1. M. Kwiatkowska, K. Chrabąszcz, Ż. Mikołajczyk, P. Kielbasiński
Próby katalizowanych enzymami syntez chiralnych nieracemicznych siarczków hydroksylowych pochodnych PTA
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź, P-115
2. M. Kwiatkowska, P. Kielbasiński
Próby chemoenzymatycznych syntez enancjomerycznie czystych aminowych pochodnych PTA
58 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk, Abstrakt S03-P164
3. K. Chrabąszcz, M. Kwiatkowska, M. Ciechańska, P. Kielbasiński
Próby syntezy chiralnych katalizatorów organicznych i ligandów na drodze chemoenzymatycznych przemian hydroksylowych pochodnych PTA
VI Sesja Magistrantów i Doktorantów Łódzkiego Środowiska Chemików, 11 czerwca 2015, Łódź
4. Ż. Mikołajczyk, M. Kwiatkowska, D. Cał, P. Kielbasiński
Próby syntezy chiralnych katalizatorów organicznych i ligandów na drodze chemoenzymatycznych przemian estrowych pochodnych PTA
VI Sesja Magistrantów i Doktorantów Łódzkiego Środowiska Chemików, 11 czerwca 2015, Łódź
5. T. Cierpiat, P. Kielbasiński, J. Łuczak, K. Wiktorska, Z. Chilmończyk, L. Śliwka
Fluorowane isoselenocyjanianowe analogi sulforafanu – synteza i aktywność biologiczna
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź, P-103
6. T. Cierpiat, P. Kielbasiński
Nowe fluorowane isoselenocyjanianowe analogi sulforafanu
58 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk, S01-P71
7. L. Madalińska, M. Kwiatkowska, P. Kielbasiński
Katalizowana enzymami synteza chiralnych nieracemicznych tlenków 2-hydroksymetylofenylofosfin
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź
8. L. Madalińska, M. Kwiatkowska, P. Kielbasiński
Próby syntezy chiralnych nieracemicznych ligandów fosfinowych
58 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk
9. A. Rzewnicka, M. Cypryk, W.H. Midura
Synteza kwasu amino-2-metylocyklopropanofosfonowego a 1,2-migracja grupy fosfonianowej
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, Łódź 16-18 kwietnia 2015, Łódź, P-107
10. J. A. Krysiak, A. Sobczak, W.H. Midura
1,2-Disulfinylo 1-fosforylocyklopropan
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź, P 116
11. A. Rzewnicka, M. Cypryk, A. Sobczak, W.H. Midura
Chiralne cyklopropylofosfoniany - problemy z migracją grupy fosforylowej
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk, S03P23
12. J. Chrzanowski, M. Rachwalski, A. M. Pieczonka, S. Leśniak, J. Drabowicz, P. Kielbasiński
Chiralne katalizatory sulfinylowe zawierające prolinol i ich zastosowanie w syntezie asymetrycznej
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź, P-113
13. D. Krasowska, J. Chrzanowski, M. Urbaniak, J. Drabowicz
Nowe chiralne tlenki α -aminometylofosfin zawierające podstawnik ze stereogenicznym atomem fosforu
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź, P-114

14. J. Chrzanowski, D. Krasowska, M. Urbaniak, J. Drabowicz
Synteza chiralnych katalizatorów Grubbs'a II generacji zawierających stereogeniczny atom fosforu
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Gdańsk, 21-25 września 2015, Gdańsk, S03P133
15. A. Zając, J. Drabowicz
Niespodziewane tworzenie chiralnych układów spiro w reakcji wybranych alkoholi z N-(t-butylosulfonylo)ftalimidem
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk, S03P160
16. A. Bodzioch, E. Kowalska, J. Skalik, P. Bałczewski
Synteza i właściwości tio-acenów
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk
17. J. Błaszczyk
Controversies around crystallographic refinement of selenomethionines in biological macromolecules
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź, P-007
18. M. Koprowski, P. Bałczewski
Zastosowanie reakcji Dielsa-Aldera izobenzofuranów w syntezie pochodnych fosfonotetrahydronaftalenów
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, 16-18 kwietnia 2015, Łódź
19. L. Czernek, M. Döchler
Cell-to-cell communication via exosomes
I Ogólnopolska Konferencja Doktorantów Nauk o Życiu – BioOpen, 20-22 kwietnia 2015, Uniwersytet Łódzki
20. A. Chwiałkowska, M. Sobczak, E. Sochacka, B. Nawrot
Molecular beacons modified with 2-thiouracyl as a tool for in vitro detection of reactive oxygen species
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), 16-18 kwietnia 2015, Łódź
21. K. Jastrzębska, A. Maciaszek, P. Guga
Thermodynamic properties of antiparallel Watson-Crick duplexes formed by stereodefined PS-oligos containing LNA units with complementary DNA and RNA templates
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), 16-18 kwietnia 2015, Łódź
22. A. Tomaszewska-Antczak, A. Maciaszek, K. Jastrzębska, B. Mikołajczyk, P. Guga
Synthesis of Stereodefined GNA-“Dinucleoside” Phosphorothioates. Assignment of Absolute Configuration at Phosphorus Atoms
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), 16-18 kwietnia 2015, Łódź
23. D. Jędrzejczyk, A. Chworos
Structured Nanoparticles Design from Sequence to 3D Structure
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), 16-18 kwietnia 2015, Łódź
24. K. Szymańska, J. Milczarek, R. Pawłowska, A. Chworos
Colocalization of phenylenevinylene conjugated oligoelectrolytes with commercially available dyes
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej (OSCO X), 16-18 kwietnia 2015, Łódź
25. A. Seda, R. Dolot, B. Nawrot
HINT3 – tajemnicze białko
I Ogólnopolskiej Konferencji Doktorantów Nauk o Życiu BioOpen, 20-22 kwietnia 2015, Łódź
26. D. Piotrkowska, A. Krakowiak
Functional analysis of P2X7 receptors
VII Konwersatorium Chemii Medycznej & VIII Sympozjum PTBI, Lublin, 17-19 września 2015
27. A. Chwiałkowska, E. Sochacka, B. Nawrot
Preliminary studies on influence of cytochrome c on oxidative desulfuration of 2-thiouridine assembled in the RNA chain
58 Zjazd Naukowy PTChem i SITPChem, 21-25 września 2015, Gdańsk
28. J. Milczarek, R. Pawłowska, B. Lukasik, R. Zurawinski, A. Chworos

Spectral characteristics of novel conjugated oligoelectrolytes-based fluorescent dyes
58 Zjazd PTChem i SITPChem, 21-25 września 2015, Gdańsk

29. B. Gostyński, M. Cypryk
Obliczenia DFT termodynamiki reakcji chemicznych w roztworze wodnym na przykładzie prostych związków krzemooorganicznych
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, Łódź, 16-18 kwietnia 2015, Łódź
30. B. Gostyński, M. Cypryk
Badania oddziaływań klatek silseskwioxanowych z enkapsulowanymi jonami metodami DFT oraz NBO
X Ogólnopolskie Sympozjum Chemii Organicznej, Łódź, 16-18 kwietnia 2015, Łódź
31. B. Gostyński, M. Cypryk
Badania oddziaływań klatek silseskwioxanowych z enkapsulowanymi jonami metodami DFT oraz NBO
III Łódzkie Sympozjum Doktorantów, 27-28 kwietnia 2015, Łódź, Poster P-106, Materiały konferencyjne str. 164
32. B. Gostyński, M. Cypryk
Badania DFT mechanizmu i enkapsulacji jonów w klatkach silseskwioxanowych oraz ich wzajemnych oddziaływań
Zjazd PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk, Streszczenia, S09P27
33. M. Szyrej, M. Cypryk
Modeling of N-H...Se=P hydrogen bonding
Zjazd PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk, Streszczenia, S13P07
34. A. Michalski, M. Socka, T. Makowski, M. Brzeziński, T. Biela
Kontrolowane formowanie nanocząstek stereokompleksu polilaktydu
58 Zjazd Naukowy PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk, plakat: S04P41
35. E. Wojtczak, M. Bednarek, T. Biedroń, M. Baśko, P. Kubisa
Mikrosfery w wyniku stereokompleksowania polilaktydu zawierającego grupy karboksylowe w obecności jonów metali
58 Zjazd Naukowy PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk, plakat: S04P10
36. G. Łapienis, E. Piórkowska, M. Cichorek, J. Bojda, A. Michalski
Porównanie właściwości gwiazdzystych i liniowych poli(L-laktydów)
58 Zjazd Naukowy PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk, plakat: S04P63
37. A. Lewandowska, M. Brzeziński, A. Michalski, M. Socka, T. Biela
Stereokompleksy PLA jako Potencjalny System Dostarczenia Leków
58 Zjazd Naukowy PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk, plakat: S04P33
38. M. Gosecka, S. Kaźmierski, J. Bojda, M. Gosecki
Hydrogel formation based on dynamic boronic compounds reactions with hyperbranched polyglycidol
58 Zjazd Naukowy PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk, Materiały Zjazdowe, cz.1. Streszczenia, str.186, S04P34
39. P. Komar, M. Gosecka, T. Basińska
Cząstki elipsoidalne: otrzymywanie oraz adsorpcja na podłożach o kontrolowanej hydrofilowości
Mała Wielka Nauka, Innowacje i idee przyszłości, 10-11 grudnia 2015, Łódź, S01_P_04, str.76
40. P. Pospiech
Mikrosfery polisiloksanowe – synteza, modyfikacje, zastosowania, Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk, Poster S04P62
41. P. Uznański, E. Bryszewska, J. Zakrzewska, A. Walkiewicz-Pietrzykowska
Nanocząstki metali szlachetnych z soli alkilokarboksylianowych o kontrolowanym składzie i strukturze
58 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk, S04P51, str. 204

42. J. Krajenta, A. Pawlak, A. Gałęski
Wytwarzanie nanowłókien polimerowych i nanokompozytów poprzez odkształcenie plastyczne kryształów polimerowych
8. Kongres Technologii Chemicznej, 30 sierpnia - 4 września 2015, Rzeszów
43. M. Grala, Z. Bartczak
Mechaniczne właściwości amorficznych i krystalicznych mieszanin biodegradowalnych polilaktydu i ataktycznego poli(hydroksymaślanu)
8. Kongres Technologii Chemicznej, 30 sierpnia - 4 września 2015, Rzeszów
44. M. Grala, Z. Bartczak
Morfologia oraz właściwości mechaniczne i termiczne mieszanin biodegradowalnych polilaktydu i ataktycznego poli(hydroksymaślanu)
58. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk
45. A. Krajenta, A. Róžański
Wpływ modyfikacji fazy amorficznej na wybrane właściwości fizyczne polietylenu
58 PTChem, 21-25 września 2015, Gdańsk
46. M. Gosecka, S. Kaźmierski, J. Bojda, M. Gosecki
Hydrogel formation based on dynamic boronic compounds reactions with hyperbranched polyglycidol.
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk
47. P. Sowiński, E. Piórkowska, S. Boyer, J-M. Haudin
Zarodkowanie pochodną sorbitolu krystalizacji polipropylenu pod podwyższonym ciśnieniem
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk
48. J. Bojda, M. Pluta, E. Piórkowska, M. Murariu, A. L. Dechief, Ph. Dubois.
Wpływ odkształceń ścinających na nieizotermiczną krystalizację nanokompozytów polilaktydu z haloizytem.
58 Zjazd Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk
49. J. Śniechowska, P. Paluch, M. J. Potrzebowski
Chloryny - synteza i badania strukturalne z wykorzystaniem spektroskopii NMR
58 Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego, 21-25 września 2015, Gdańsk

Spis publikacji przyjętych do druku w 2015 r.:

a. Monografie, syntezy, podręczniki:

1. A. Maciaszek, P. Guga
Nucleotides and Nucleic Acids: Mononucleotides
Specialist Periodic Report, Organophosphorous Chemistry, vol 45 (The Royal Society of Chemistry)
2. G. Lapienis
Ring-Opening Polymerization of Cyclic Phosphorus Monomers
w Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. Saleem Hashmi (editor-in-chief), Oxford: Elsevier; 2016, str. 1-48
3. S. Słomkowski
Overview of Synthesis of Functional Polyesters
Chapter in Handbook of Polyester Drug Delivery Systems (galley proof)
Ed. M. N. V. Ravi Kumar, Pan Stanford Publishing Pte. Ltd.

b. Artykuły przeglądowe:

1. M. Cypryk
Polymerization of Cyclic Siloxanes, Silanes, And Related Monomers
Saleem Hashmi (editor-in-chief). Reference Module in Materials Science and Materials Engineering, Oxford: Elsevier, 2016, p 1-35

2. R. Szymański
Equilibrium Copolymerization in Ring-Opening Polymerization
Saleem Hashmi (editor-in-chief). Reference Module in Materials Science and Materials Engineering, Oxford: Elsevier, 2016, p 1-22
3. K. Gradzińska, K. Łabęcka, A. Kowalewska, W.A. Stańczyk
Silseskwioxanowe nanonośniki w diagnostyce i biomedycynie
Polimery

c. Artykuły naukowe:

1. E.Stoczynska-Fidelus, S. Piaskowski, R. Pawlowska, M. Szybka, J.A. Peciak, K. Hulas-Bigoszewska, M. Winiecka-Klimek, P. Rieske
Genetic heterogeneity of a T-acute lymphoblastic leukemia cell line, RPMI-8402
Oncology Lett. (2015)
2. R. Dolot, R. Kaczmarek, A. Sęda, A. Krakowiak, J. Baraniak, B. Nawrot
Crystallographic studies of the complex of human histidine triad nucleotide-binding protein 1 (hHINT1) with a non-hydrolyzable analog of Ap4A
Int. J. Biol. Macromol. (2015)
3. R. Szymanski, S. Sosnowski, M. Cypryk
Evolution of Chain Microstructure and Kinetics of Reaching Equilibrium in Reversible Copolymerization
Macromol. Theory Simul. DOI: 10.1002/mats.201500047 (2016)
4. M. Cypryk, B. Gostyński
Computational benchmark for calculation of silanes and siloxane energetics
J. Mol. Model. DOI: 10.1007/s00894-015-2900-1
5. P. Pospiech, J. Chojnowski, M. Mizerska, T. Makowski, K. Strzelec, N. Sienkiewicz.
Polysiloxane microspheres functionalized with imidazole groups as a palladium catalyst support, Applied Organometallic Chemistry
6. M. Gleńsk, J. A. Gliński, M. Jamróz, P. Stefanowicz, S. Kaźmierski
Phenolic Constituents from Alchornea castaneifolia
Rec. Nat. Prod. **10:1**, 32-39, (2016)

WYKAZ PLANOWANYCH NA 2016 R. ZADAŃ W RAMACH DZIAŁALNOŚCI STATUTOWEJ

1. Chemia i stereochemia połączeń heteroorganicznych o różnych stopniach koordynacji.
2. Achiralne i chiralne reagenty i katalizatory heteroorganiczne w syntezie produktów biologicznie czynnych.
3. Nowe połączenia metaloheteroorganiczne: badania struktury, reaktywności i zastosowanie.
4. Biokatalityczne metody syntezy chiralnych połączeń heteroorganicznych i badanie ich struktury.
5. Nowe materiały do zastosowań w organicznej elektronice.
6. Samoorganizujące się materiały molekularne dla nowoczesnych technologii przetwarzania informacji i energii.
7. Synteza i właściwości P-modyfikowanych analogów nukleotydów i oligonukleotydów.
8. Analogi nukleotydów jako inhibitory enzymów.
9. Oddziaływania analogów nukleotydów i oligonukleotydów z DNA, RNA, wybranymi białkami i syntetycznymi polimerami.
10. Analogi nukleotydów, nukleotydów i oligonukleotydów w biologii syntetycznej i komórkowej.
11. Analiza krystalograficzna katalitycznych kwasów nukleinowych oraz niskocząsteczkowych ligandów – analogów nukleotydów.
12. Komórkowe modele do określania aktywności przeciwnowotworowej związków niskocząsteczkowych.
13. Teoretyczne badania mechanizmu katalitycznego podstawienia nukleofilowego przy krzemie.
14. Modelowanie złożonych układów homo i kopolimeryzacyjnych.
15. Modelowanie procesów homo i kopolimeryzacji zachodzących w bardzo małych objętościach (skala nano).
16. Liniowe i szczepione kopolimery otrzymywane z pochodnych kwasów fosforu.
17. Kontrolowana (ko)polimeryzacja cyklicznych estrów alifatycznych: mechanizmy i zastosowania w syntezie polimerów o założonej strukturze.
18. Reaktywne polimery cyklicznych estrów i cyklicznych eterów.
19. Wytwarzanie i charakterystyka ultracienkich warstw krzemoorganicznych z fazy gazowej z alkoksylanów w zdalnej plazmie wodorowej.
20. Badania syntezy i właściwości fizykochemicznych nowych materiałów krzemoorganicznych zawierających struktury silseskwioksanowe.
21. Lokalne właściwości fizykochemiczne warstwy powierzchniowej mikrosfer polimerowych o budowie rdzeń-powłoka, o hydrofobowym rdzeniu i o hydrofilowej warstwie powierzchniowej.
22. Synteza boczołańcuchowych polisiloksanów z ugrupowaniami perylenowymi.
23. Otrzymywanie funkcyjnych materiałów krzemoorganicznych.
24. Wytworzenie cienkich foli organicznych metodą „*zone casting*” oraz cienkich warstw organicznych wzbogaconych nanorurkami węglowymi i tlenkiem grafenu.
25. Właściwości fizyczne krystalizujących układów polimerowych - nanokompozyty i polimery krystalizujące.
26. Zbadanie zależności między budową polimeru częściowo krystalicznego a procesami deformacji plastycznej i kawitacji podczas odkształcania.
27. Otrzymywanie, zestalanie i właściwości nowych kopoliestrów alifatyczno-aromatycznych.
28. Wpływ ograniczeń przestrzennych na orientację nanocząstek i formowanie się struktury z wykorzystaniem techniki powielania warstw we współwytłaczaniu.
29. Nanokompozyty w pełni polimerowe: otrzymywanie i badanie właściwości.
30. Kompozyty i nanokompozyty polimerowe.
31. Krystalizacja polimerów pod wpływem odkształceń ścinających.
32. Rozwój metodologii badań układów bioorganicznych z wykorzystaniem spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) i spektrometrii mas.
33. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) i spektrometria mas w analizie procesów fizykochemicznych prowadzonych w fazie stałej.
34. Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) jako narzędzie w badaniach organizacji fazy substancji polidispersyjnych.

Program Sesji

Czwartek, 4 lutego 2016 roku

1. 09.00 - 09.45

Otwarcie Sesji, Podsumowanie roku 2015.
Prof. dr hab. Marek Potrzebowski

Przewodniczący: prof. S. Słomkowski

2. 09.45 - 10.15

Sprawozdanie Komisji ds. Oceny Pracowników Naukowych o wynikach oceny asystentów i adiunktów CBMiM PAN za okres 2010 - 2014, prof. dr hab. Barbara Nawrot.

3. 10.15 - 10.45

Wystąpienie prof. E. Piórkowskiej. Najwyższy wskaźnik parametryczny w 2015 r.

10:45 - 11:00

przerwa na kawę

4. 11.00 - 11.20

Wystąpienie Lidera najlepszego zespołu CBMiM PAN w roku 2015. Najwyższy wskaźnik EZ.

5. 11.20 - 11.40

Wystąpienie Lidera najlepszego zespołu CBMiM PAN w latach 2013-2015.

Najwyższy wskaźnik EZ.

6. 11.40 - 12.00

Wystąpienie prof. Piotra Kaszyńskiego. Lider nowego zespołu.

Sprawozdania z Grantów, które zakończyły się w 2015 r.

Przewodniczący: prof. M. Cypryk

7. 12.00 - 12.20

Prof. Piotr Guga. „Stereozdefiniowane tiofosforanowe analogi DNA zawierające wtrącone jednostki nukleozydowe typu LNA - synteza i właściwości kompleksów utworzonych z matrycami DNA i RNA”.

8. 12.20 - 12.40

Prof. B. Nawrot. „Badania desulfuracji 2-tiourydyn w kontekście uszkodzeń tRNA w warunkach stresu oksydacyjnego”.

9. 12.40- 13.00

Dr T. Makowski. „Możliwości wielofunkcyjnej modyfikacji tkanin zawierających sieć przewodząca utworzoną z wielościennych nanorurek węglowych”.

13:00 - 14:00

przerwa na lunch

10. 14.00-14.20

Prof. A. Kowalewska. „Badania procesów wytwarzania i strukturyzowania nowych materiałów hybrydowych”.

11. 14.20-14.40

Dr J. Skalik. „Nowe podejście do syntezy nieliniowo skondensowanych policyklicznych węglowodorów (hetero)aromatycznych z użyciem (hetero)aromatycznych di- i tetraaldehidów jako prekursorów.

12. 14.40-15.00

Dr K. Królewska. „Związki o potencjalnych właściwościach przeciwnowotworowych z grupy pochodnych benzo[b]furanów i dikarboksymidów – badanie mechanizmu działania w komórkach ludzkich”.

13. 15.00-15.20

Dr hab. A. Chworoś. „Badanie tworzenia kompleksu tRNA/cytochrom C i jego wpływ na apoptozę komórki”.

Wykaz wniosków NCN_grudzień 2015:

Przewodniczący: prof. Z. Bartczak

14. 15.20- 15.40

Dr Viktor Iaroshenko, "Katalizowane metalami przejściowymi ukierunkowane reakcje aktywacji wiązania C-H nitropodstawionych związków aromatycznych i olefin wraz z dalszą transformacją grupy nitrowej.", SONATA, ST5, 698 800 PLN.

15. 15.40 - 16.00

Dr Tomasz Makowski, "Włókny biodegradowalne z przestrzenną siecią wielościennych nanorurek węglowych, możliwości wielofunkcyjnej modyfikacji", SONATA, ST8, 351 600 PLN.

16. 16.00 - 16.15

Mgr Maria Nowacka, "Nowe polimerowe materiały hybrydowe jako sensory obecności jonów metali.", PRELUDIUM, ST4, 149 400 PLN.

17. 16.15 - 16.30

Mgr Justyna Milczarek, "Pochodne styrylonaftalenowe jako Skoniugowane Oligoelektrolity do wizualizacji struktur komórkowych", PRELUDIUM, ST5, 100 000 PLN.

18. 16.30 - 16.45

Mgr Beata Dominika Łukasik, "Synteza nowego chiralnego bloku budulcowego i jego zastosowanie w totalnej syntezie krzyżowosprężonego cyklopentenonowego prostanoidu wykazującego aktywność przeciwnowotworową.", PRELUDIUM, ST5, 49 960 PLN.

19. 16.45 - 17.00 Zamknięcie sesji