

Księga abstraktów



Książka abstraktów została przygotowana na podstawie przesłanych abstraktów przez uczestników III Pomorskiego Studenckiego Sympozjum Chemicznego. Organizatorzy wydarzenia nie ponoszą odpowiedzialności za ich treść pod względem cywilno-prawnym, a w szczególności prawa autorskiego.

SPIS TREŚCI

INFORMACJE O III POMORSKIM STUDENCKIM SYMPOZJUM CHEMICZNYM ..9	
ORGANIZATORZY	10
KOMITET ORGANIZACYJNY	10
KOMITET NAUKOWY	11
OPRACOWANIE REDAKCYJNE	11
PROJEKT OKŁADKI	12
OBSŁUGA TELEINFORMATYCZNA SYMPOZJUM	12
PATRONAT HONOROWY	13
PATRONAT	14
PATRONAT MEDIALNY	14
PARTNERZY	15
HAROMONOGRAM	16
WYKŁADY INAUGURACYJNE	20
PREZENTACJE BADANIA WŁASNE	21
Three-dimensional imaging of lyotropic mesophases	22
Biochemical and nanomechanical analysis of normal and cancer cells of human colon supplemented with vitamin C exposed on ROS by Raman imaging, AFM and fluorescence staining	23
Elektrochemia jako narzędzie do analizy substancji domieszkujących narkotyki	24
Modyfikacja elastomerów pod kątem poprawy ich adhezji do srebra	25
Ocena stabilności wybranych hydroksypochodnych wielopierscieniowych węglowodorów aromatycznych w próbkach środowiskowych	26
Opis natury oddziaływań w pochodnych naftalenu oraz naftochinonu metodami modelowania molekularnego	27
Charakterystyka właściwości fizykochemicznych i ich związków z aktywnością biologiczną pochodnych penicyliny i antybiotyków glikopeptydowych w oparciu o wybrane metody modelowania molekularnego	28
Wykorzystanie obliczeń DFT, spektroskopii impedancyjnej, TG i XRD do opisu procesu dehydroksylacji smektytu	29

Biosynteza i oczyszczanie rekombinowanego białka łącznikowego bakteriofaga TP-84..	30
Noble metal nanoplate-mediated photothermal therapy	31
Badania interakcji rekombinantowych białek z dedykowanymi biocenzymami z wykorzystaniem technologii Blitz.....	32
Wpływ właściwości nośnika oraz dodatku żelaza na aktywność katalizatorów niklowych na tlenku tytanu (IV) w reakcji uwodornienia 5-hydroksymetylofurfuralu	33
Mikroplatformy na bazie kapilar krzemionkowych jako sensory w ilościowym oznaczeniu chininy w toniku	34
Wpływ preparatyki katalizatorów niklowych na aktywność w reakcji uwodornienia kwasu lewulinowego do γ -walerolaktonu	35
Catalysis of the Z-E Isomerization of Azobenzene by Gold Nanorods	36
Synteza oraz porównanie właściwości fluorescencyjnych pochodnych pirolo[2,3- <i>b</i>]chinoksalin.	37
Efektywne receptory soli oparte na szkielecie kwasu 2,2-bis(amionometylo)propionowego: synteza i właściwości kompleksotwórcze.....	38
N-tlenek acetonitrylu w reakcjach ze sprzężonymi nitroalkanami.....	39
Porównanie zawartości polifenoli łącznie i kwasu mlekowego w sfermentowanym soku warzyw kapustnych.....	40
Wpływ sposobu podstawienia liganda pirenowego na właściwości tworzonych przez niego związków koordynacyjnych osmu	41
PREZENTACJE POPULARNONAUKOWE	42
Postęp i wyzwania w badaniach nad mikro- i nanoplastikiem.....	43
Związki organiczne oparte na układach heterocyklicznych sześcioczłonowych mające właściwości neuroleptyczne, nasenne i uspokajające	44
Składniki aktywne w kosmetologii	45
Kompatybilność rop naftowych – a komu to potrzebne?.....	46
Kombucha pod lupą	47
Występowanie środków ochrony roślin i ich metabolitów w środowisku wodnym	48
Izoksazolidyny i izoksazoliny – charakterystyka, znaczenie biologiczne i metody syntezy	49
Zolgensma® - jak działa najdroższy lek świata?	50

Wpływ modyfikacji plazmowej na właściwości elektroprzewodzonych nanowłókien polimerowych	51
Fluorowane polimery i ich zastosowania	52
POSTERY BADANIA WŁASNE	53
Wpływ NH ₂ -UiO-66 (Zr) osadzonych na powierzchni TiO ₂ NTs na właściwości fotodegradujące zanieczyszczenia	54
Proces hydratacji PF ₅ – obliczenia kwantowo–mechaniczne	55
Cykloprzłączenie 1-alkilopodstawionych analogów nitroetenu do wybranych diazowiazków	56
Porównanie skuteczności mikroskopii fluorescencyjnej w badaniu niebieskich i popielatoczarnych włókien dzinsowych	57
NtZIP11 – nowy transporter cynku z tytoniu i jego potencjalne wykorzystanie w fitoremediacji	58
Synteza Powierzchni Samoczyszczących- Projekt NKCh Klimatyczni	59
Nieparametryczna regresja lokalnie ważona jądrem w przewidywaniu toksyczności ostrej mieszanin chemicznych	60
Hybrydowe opatrunki na trudno gojące się rany	61
Modelowanie procesu poliaddycji w układzie dwóch monomerów dwufunkcyjnych	62
Ocena składu chemicznego ekstraktów z kminku zwyczajnego (<i>Carum carvi</i> L.) i fenkułu włoskiego (<i>Foeniculum vulgare</i> Mill.) i ich aktywności antygrzybowej wobec <i>Fusarium oxysporum</i>	63
Synteza i badanie właściwości fluoroscencyjnych pochodnych imidowych	64
Nanocząstki metali-skuteczna metoda zwalczania patogenów	65
Niezwykłe nanocząstki tellurku cynku	66
Podwójne ciecze jonowe jako związki o budowie amfifilowej	67
Computational approach to the behaviour of ions and water molecules in artificial membrane channel	68
Zawartość mikroplastiku pochodzącego z opon w pyłe z jezdni	69
Synteza 5-azydo-2,3-O-acetylo-1,4-anhydro-D,L-ksylitolu	70
Rtęć w chorych rybach z Zatoki Puckiej	71

Z-(3,4,5-trimetoksyfenylo-N-metylonitron jako aktywowany nukleofilowo TAC w reakcjach [3+2] cykloaddycji.....	72
POSTERY POPULARNONAUKOWE	73
Kolorowy zawrót głowy	74
CBD w leczeniu uzależnienia od kokainy	75
Toksyczność karbamazepiny w środowisku a globalne ocieplenie	76
DNA Origami – od sieci DNA do Mona Lisy	77
1,4-Dihydropirydyny – otrzymywanie i charakterystyka wybranych pochodnych oraz omówienie ich aktywności biologicznej	78
Czy produkcja papieru jest przyjazna środowisku?	79
Rozwój immunoterapii nowotworowej – rozwój inhibitorów checkpointu immunologicznego PD-1/PD-L1	80
Mikroplastik w kosmetykach – realne zagrożenie środowiska	81
Regio- i stereoselektywna synteza heterocykli na drodze [3+2] cykloaddycji	82
Wpływ antybiotyków na sinice <i>Microcystis aeruginosa</i>	83
Pierwiastki Ziemi nie tak bardzo Rzadkich.....	84
Biomateriały przyszłości - inżynierowany jedwab pajęczy	85
„Inteligentne” hydrożele w terapii szytej na miarę	86
Recykling chemiczny włókien syntetycznych	87
Proces powstawania i dopuszczania leku do obrotu – jak wygląda w praktyce?.....	88
2-tiotymina jako potencjalny radiosensybilizator biologiczny.....	89
Olejki eteryczne w kosmetykach	90
Związki kompleksowe jako nowa generacja fotosensybilizatorów w terapii fotodynamicznej (PDT)	91
Hordenina w suplementach diety	92
Katelicydyna LL-37 peptyd antymikrobiotyczny o działaniu terapeutycznym	93
Antyoksydanty – czy czerwone wino wydłuży nam życie?.....	94
Usuwanie metali ciężkich z gleby metodą fitoekstrakcji	95
Amantadyna: synteza, właściwości oraz aktywność wobec Covid-19.....	96
Zdrowie ukryte w czekoladzie	97
Losy leków w środowisku wodnym.....	98

Biodruk 3D – przyszłość medycyny regeneracyjnej.....	99
Perowskity, czyli o rewolucji w przemyśle energetycznym	100
Reakcje [3+2] cykloaddycji – zastosowanie w syntezie organicznej.....	101
Czy zawsze można ufać podręcznikom akademickim?	102
Problematyczna definicja mola	103
Elektrokatalizatory jako klucz do zrównoważonej produkcji wodoru	104
Pirazoliny- charakterystyka, znaczenie biologiczne i metody syntezy	105
Tataże – czym właściwie jest tusz pod naszą skórą?	106
Czy ściany mogą produkować prąd? Kilka słów na temat modułów BIPV oraz konwerterów spektralnych.	107
NAGRODZONE WYSTĄPIENIA.....	108



W I Ę
C E J
N I Ź
C H E
M I A

INFORMACJE O III POMORSKIM STUDENCKIM SYMPOZJUM CHEMICZNYM

Pomorskie Studenckie Sympozjum Chemiczne (PSSCh) to cykliczna ogólnopolska konferencja naukowa przeznaczona dla studentów, doktorantów i młodych naukowców, którzy chcą przedstawić swoje badania naukowe, bądź badania przeglądowe o charakterze popularnonaukowym z zakresu chemii, ochrony środowiska oraz ekologii. Jednym z wielu atutów PSSCh jest fakt, że sesje prezentacji i posterowe odbywają się w czasie rzeczywistym – Prelegenci przedstawiają na żywo swoje wyniki badań, po czym dyskutują z pozostałymi Uczestnikami.

III edycja Sympozjum odbyła się w dniach 18-19.09.2021 r. w której wzięło udział 86 Prelegentów przedstawiając komunikaty ustne oraz posterowe z 19 ośrodków naukowych z całej Polski. Organizatorami aktualnej edycji byli: Bałtyckie Stowarzyszenie Chemików we współpracy z Naukowym Kołem Chemików Uniwersytetu Gdańskiego oraz Radą Samorządu Studentów Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. Opiekę merytoryczną nad Sympozjum sprawowali Członkowie Komitetu Naukowego w skład którego wchodziła naukowcy z trzech Pomorskich Uczelni: Uniwersytetu Gdańskiego, Politechniki Gdańskiej oraz Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego. Sympozjum wsparły poprzez udzielone Patronaty: pomorskie ośrodki naukowe i samorząd terytorialny, organizacje i instytucje krajowe oraz platformy medialne.

Podczas Sympozjum zostały wygłoszone dwa wykłady inauguracyjne oraz jedno wystąpienie gościnne: pierwszego dnia (18.09) wykład inauguracyjny pt. „Od liniowych do bicyklicznych ligandów peptydowych” wygłosiła Pani prof. dr hab. Justyna Brasuń z Uniwersytetu Medycznego im. Piastów Śląskich we Wrocławiu; drugiego dnia (19.09) wykład inauguracyjny pt. „Wpływ branży chłodniczej na środowisko - 25 lat sieci 3R w Polsce” wygłosił Pan Prezes Krzysztof Grzegorzczak z PROZON Fundacji Ochrony Klimatu; drugiego dnia (19.09) wystąpienie gościnne pt. „KRD - prezentacja profilu organizacji” wygłosiła Pani mgr Patrycja Uram z Krajowej Reprezentacji Doktorantów.

Dziękujemy wszystkim Prelegentom oraz Uczestnikom za udział w III Pomorskim Studenckim Sympozjum Chemicznym i życzymy dalszych sukcesów w badaniach naukowych oraz wielu grantów.

*W imieniu Komitetu Organizacyjnego
III Pomorskiego Studenckiego Sympozjum Chemicznego*



mgr Patrycja Laszuk

*Przewodnicząca Komitetu Organizacyjnego
III Pomorskiego Sympozjum Chemicznego*

ORGANIZATORZY

Organizatorami III edycji Pomorskiego Studenckiego Sympozjum Chemicznego byli:



Bałtyckie Stowarzyszenie Chemików (KRS 0000750840)

we współpracy z



Naukowe Koło Chemików Uniwersytetu
Gdańskiego



Rada Samorządu Studentów Wydziału Chemii
Uniwersytetu Gdańskiego

KOMITET ORGANIZACYJNY

Przewodnicząca Komitetu Organizacyjnego
mgr Patrycja Laszuk

Lider zespołu ds. Rejestracji i Uczestnictwa
mgr Marta Makowska

Lider zespołu ds. Marki i Promocji
mgr Anna Czaja

Lider zespołu ds. Administracji
Damian Makowski

Lider zespołu ds. Technicznych
Emilia Mykowska

Biuro Konferencji
mgr Mateusz Adam Baluk
mgr inż. Karolina Jaworska

Członkowie zespołów
Katarzyna Baran
mgr Daniel Górzyński
mgr inż. Beata Judzińska
Simona Kołek
mgr inż. Malwina Kroczevska
Agnieszka Manikowska
Dominika Skoroszewska
Szymon Świętek Brzeziński

KOMITET NAUKOWY

Przewodnicząca Komitetu Naukowego
prof. uczelni, dr hab. Magdalena Joanna Górska – Ponikowska,
Gdański Uniwersytet Medyczny

prof. uczelni, dr hab. Dagmara Jacewicz,
Uniwersytet Gdański

prof. uczelni, dr hab. Henryk Myszka,
Uniwersytet Gdański

dr inż. Maciej Sienkiewicz,
Politechnika Gdańska

dr Joanna Drzeżdżon,
Uniwersytet Gdański

dr Natalia Gruba,
Uniwersytet Gdański

dr Daria Grzywacz,
Uniwersytet Gdański

OPRACOWANIE REDAKCYJNE

mgr Patrycja Laszuk
mgr inż. Malwina Kroczevska
mgr Mateusz Adam Baluk
mgr inż. Karolina Jaworska

PROJEKT OKŁADKI

mgr Patrycja Laszuk

OBSŁUGA TELEINFORMATYCZNA SYMPOZJUM

mgr Mateusz Adam Baluk

Emilia Mykowska

ISBN 978-83-958623-2-8



© Gdańsk 2021

PATRONAT HONOROWY



PATRONAT HONOROWY

Rektor Uniwersytetu Gdańskiego
prof. dr hab. Piotr Stepnowski



PATRONAT HONOROWY

Rektor Politechniki Gdańskiej
prof. dr hab. inż. Krzysztof Wilde



PATRONAT HONOROWY

REKTOR
GDAŃSKIEGO UNIWERSYTETU MEDYCZNEGO
prof. dr hab. Marcin Gruchała



Dziekan
Wydziału Chemii
dr hab. Beata Grobelna, prof. UG



PATRONAT HONOROWY

Prezydent
Miasta Gdańska

PATRONAT HONOROWY:



MIECZYŚLAW STRUK
MARSZAŁEK
WOJEWÓDZTWA POMORSKIEGO



PATRONAT



PATRONAT MEDIALNY



PARTNERZY



GDAŃSKI PARK
NAUKOWO-
TECHNOLOGICZNY



Polska
Strefa Inwestycji



POMORSKA
SPECJALNA STREFA
EKONOMICZNA



GDAŃSK

eppendorf

Experiment
centrum nauki

HARMONOGRAM

Sobota 18.09.2021 r.

	9 ⁰⁰ -9 ¹⁵	Ocjalne rozpoczęcie III PSSCh oraz przywitanie wszystkich uczestników wydarzenia
	9 ¹⁵ -10 ⁰⁰	WYKŁAD INAUGURACYJNY I DZIĘŃ  prof. dr hab. Justyna Brasuń, Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu, Od liniowych do bicyklicznych ligandów peptydowych
sesja prezentacji 1	10 ⁰⁰ -10 ¹⁵	Karolina Beton, Politechnika Łódzka, bw <i>„Biochemical and nanomechanical analysis of normal and cancer cells of human colon supplemented with vitamin C exposed on ROS by Raman imaging, AFM and fluorescence staining”</i>
	10 ¹⁵ -10 ³⁰	Maciej Prusinowski, Uniwersytet Gdański, bw <i>„Badania interakcji rekombinowanych białek z dedykowanymi biocjulkami z wykorzystaniem technologii Blitz”</i>
	10 ³⁰ -10 ⁴⁵	Dominika Benkowska-Biernacka, Politechnika Wroclawska, bw <i>„Three-dimensional imaging of lyotropic mesophases”</i>
	10 ⁴⁵ -11 ⁰⁰	Przerwa 
	11 ⁰⁰ -11 ⁴⁵	Sesja posterowa A
	11 ⁴⁵ -12 ⁰⁰	Przerwa 
	12 ⁰⁰ -12 ¹⁵	Patrycja Laszuk, Uniwersytet Gdański, bw <i>„Biosynteza i oczyszczanie rekombinowanego białka łącznikowego bakteriofaga TP-84”</i>
	12 ¹⁵ -12 ³⁰	Łukasz Grabowski, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, pop <i>„Związki organiczne oparte na układach heterocyklicznych sześcioczłonowych mające właściwości neuroleptyczne, nasenne i uspokajające”</i>
sesja prezentacji 2	12 ³⁰ -12 ⁴⁵	Magdalena Zakrocka, Uniwersytet Jagielloński, bw <i>„Synteza oraz porównanie właściwości fluorescencyjnych pochodnych pirolo[2,3-b]chinoksalin”</i>
	12 ⁴⁵ -13 ⁰⁰	Mikołaj Sadowski, Politechnika Krakowska, pop <i>„Izoksazoliny i izoksazoliny – charakterystyka, znaczenie biologiczne i metody syntezy”</i>
	13 ⁰⁰ -13 ¹⁵	Karolina Zawadzka, Politechnika Krakowska im. T. Kościuszki w Krakowie, bw <i>„N-tlenek acetonitrylu w reakcjach ze sprzężonymi nitroalkenami”</i>
	13 ¹⁵ -13 ³⁰	Patryk Zdziobek, AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, bw <i>„Porównanie zawartości polifenoli łącznie i kwasu mlekowego w sfermentowanym soku warzyw kapustnych”</i>
	13 ³⁰ -13 ⁴⁵	Dominika Załubiniak, Uniwersytet Warszawski, bw <i>„Efektywne receptory soli oparte na szkielecie kwasu 2,2-bis(aminometyl)propionowego: synteza i właściwości kompleksotwórcze”</i>
	13 ⁴⁵ -14 ⁰⁰	Przerwa 
	14 ⁰⁰ -14 ⁴⁵	Sesja posterowa B
	14 ⁴⁵ -15 ⁰⁰	Przerwa 
sesja prezentacji 3	15 ⁰⁰ -15 ¹⁵	Nina Tarnowicz-Staniak, Politechnika Wroclawska, bw <i>„Catalysis of the Z-E Isomerization of Azobenzene by Gold Nanorods”</i>
	15 ¹⁵ -15 ³⁰	Emilia Soszka, Politechnika Łódzka, bw <i>„Wpływ preparatyki katalizatorów niklowych na aktywność w reakcji uwodornienia kwasu lewulinowego do γ-walerolaktanu”</i>
	15 ³⁰ -15 ⁴⁵	Paulina Borgul, Uniwersytet Łódzki, bw <i>„Elektrochemia jako narzędzie do analizy substancji domieszkujących narkotyki”</i>
	15 ⁴⁵ -16 ⁰⁰	Joanna Chudzik, Politechnika Łódzka, bw <i>„Modyfikacja elastomerów pod kątem poprawy ich adhezji do srebra”</i>
	16 ⁰⁰ -16 ¹⁵	Mariusz Zalewski, Politechnika Śląska, pop <i>„Fluorowane polimery i ich zastosowania”</i>
	16 ¹⁵ -16 ³⁰	Angelika Winkler, Politechnika Wroclawska, pop <i>„Wpływ modyfikacji plazmowej na właściwości elektroprzewodzonych nanowłókien polimerowych”</i>
	16 ³⁰ -16 ⁴⁵	Przerwa 
	16 ⁴⁵ -17 ³⁰	Sesja posterowa C
	17 ³⁰	Zakończenie pierwszego dnia sympozjum

	9 ⁰⁰ -9 ¹⁵	Rozpoczęcie drugiego dnia III Pomorskiego Sympozjum Chemicznego
	9 ¹⁵ -10 ⁰⁰	WYKŁAD INAUGURACYJNY II  Prezes PROZON Fundacji Ochrony Klimatu - Pan Krzysztof Grzegorzczk, <i>Wpływ branży chłodniczej na środowisko - 25 lat sieci 3R w Polsce</i>
sesja prezentacji 4	10 ⁰⁰ -10 ¹⁵	Justyna Durak , Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, <i>bw</i> <i>„Ocena stabilności wybranych hydroksypochodnych wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych w próbkach środowiskowych”</i>
	10 ¹⁵ -10 ³⁰	Aneta Kohnke , Uniwersytet Gdański, <i>pop</i> <i>„Występowanie środków ochrony roślin i ich metabolitów w środowisku wodnym”</i>
	10 ³⁰ -10 ⁴⁵	Karolina Sobczak , Uniwersytet Łódzki, <i>bw</i> <i>„Mikroplatformy na bazie kapilar krzemionkowych jako sensory w ilościowym oznaczeniu chininy w toniku”</i>
	10 ⁴⁵ -11 ⁰⁰	Przerwa 
	11 ⁰⁰ -11 ⁴⁵	Sesja posterowa D
	11 ⁴⁵ -12 ⁰⁰	Przerwa 
	12 ⁰⁰ -12 ¹⁵	WYSTĘP GOŚCINNY  Krajowa Reprezentacja Doktorantów, Patrycja Uram <i>KRD - prezentacja profilu organizacji</i>
sesja prezentacji 5	12 ¹⁵ -12 ³⁰	Maria Nevarez Martinez , Uniwersytet Gdański, <i>bw</i> <i>„Noble metal nanoplate-mediated photothermal therapy”</i>
	12 ³⁰ -12 ⁴⁵	Katarzyna Krupka , Uniwersytet Wrocławski, <i>bw</i> <i>„Charakterystyka właściwości fizykochemicznych i ich związek z aktywnością biologiczną pochodnych penicyliny i antybiotyków glikopeptydowych w oparciu o wybrane metody modelowania molekularnego”</i>
	12 ⁴⁵ -13 ⁰⁰	Beata Kizior , Politechnika Wroclawska, <i>bw</i> <i>„Opis natury oddziaływań w pochodnych benzochinolinylu oraz naftalenu metodami modelowania molekularnego”</i>
	13 ⁰⁰ -13 ¹⁵	Martyna Przydacz , Politechnika Łódzka, <i>bw</i> <i>„Wpływ właściwości nośnika oraz dodatku żelaza na aktywność katalizatorów niklowych na tlenku tytanu (IV) w reakcji uwodornienia 5 hydroksymetylofurafalu”</i>
	13 ¹⁵ -13 ³⁰	Karol Kułacz , Uniwersytet Wrocławski, <i>bw</i> <i>„Wykorzystanie obliczeń DFT, spektroskopii impedancyjnej TG i XRD do opisu procesu dehydroksylacji smektytu”</i>
	13 ³⁰ -14 ⁰⁰	Przerwa 
	14 ⁰⁰ -14 ⁴⁵	Sesja posterowa E
	14 ⁴⁵ -15 ⁰⁰	Przerwa 
sesja prezentacji 6	15 ⁰⁰ -15 ¹⁵	Klaudia Szczerba , Uniwersytet Wrocławski, <i>pop</i> <i>„Zolgensma® - jak działa najdroższy lek świata?”</i>
	15 ¹⁵ -15 ³⁰	Anna Kaczmarek , Uniwersytet Wrocławski, <i>pop</i> <i>„Kombucha pod lupą”</i>
	15 ³⁰ -15 ⁴⁵	Monika Hryniewicz , Politechnika Wroclawska, <i>pop</i> <i>„Składniki aktywne w kosmetologii”</i>
	15 ⁴⁵ -16 ⁰⁰	Przemysław Jarosiński , Politechnika Warszawska, <i>pop</i> <i>„Kompatybilność rop naftowych – a komu to potrzebne?”</i>
	16 ⁰⁰ -16 ¹⁵	Szymon Gaca , Politechnika Poznańska, <i>pop</i> <i>„Postęp i wyzwania w badaniach nad mikro- i nanoplastikiem”</i>
	16 ¹⁵ -16 ³⁰	Dawid Zych , Wroclawska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej, <i>bw</i> <i>„Wpływ sposobu podstawienia liganda pirenowego na właściwości tworzonych przez niego związków koordynacyjnych osmu”</i>
	16 ³⁰	Zakończenie III Pomorskiego Sympozjum Chemicznego

Harmonogram sesji posterowych

18.09.2021 (SOBOTA) g. 11⁰⁰-11⁴⁵

SESJA A

- Poster 1: Agata Kowalska Uniwersytet Gdański „Mikroplastik w kosmetykach – realne zagrożenie środowiska” (pop)
- poster 2: Emilia Mykowska „2-tiotymina jako potencjalny radiosensybilizator biologiczny” (bw)
- Poster 3: Beata Szreniawa Politechnika Krakowska „Nanocząstki metali-skuteczna metoda zwalczania patogenów?” (bw)
- Poster 4: Martyna Zakrzewska Uniwersytet Gdański „Rtęć w chorych rybach z Zatoki Puckiej?” (bw)
- Poster 5: Jagoda Worek Akademia Górniczo-Hutnicza „Zawartość mikroplastiku pochodzącego z opon w pyłe z jezdni” (bw)
- Poster 6: Katarzyna Klimsiak Politechnika Gdańska „Czy produkcja papieru jest przyjazna środowisku?” (pop)
- Poster 7: Anita Rzadkiewicz Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu „Usuwanie metali ciężkich z gleby metodą fitoekstrakcji” (pop)
- Poster 8: Szymon Świątek Brzeziński “Perowskity, czyli o rewolucji w przemyśle energetycznym (pop)
- Poster 9: Michalina Miszcak Uniwersytet Gdański „Nieparametryczna regresja lokalnie ważona jądrem w przewidywaniu toksyczności ostrej mieszanin chemicznych”
- Poster 10: Daria Łada Uniwersytet Gdański „Biomateriały przyszłości - inżynierowany jedwab pajęczy?” (pop)
- Poster 11: Sylwia Skórkiewicz Uniwersytet Jagielloński „Lasy leków w środowisku wodnym” (pop)

18.09.2021 (SOBOTA) g. 14⁰⁰-14⁴⁵

SESJA B

- Poster 1: Klaudia Zaręba Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki „2-(3,4,5-trimetyksyfenilo-N-metylonitron jako aktywowany nukleofilowo TAC w reakcjach cykloaddycji” (bw)
- Poster 2: Adrianna Wójtowicz Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki „Pirazoliny- charakterystyka, znaczenie biologiczne i metody syntezy” (pop)
- Poster 3: Jolanta Utnicka Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki „Reakcje [3+2] cykloaddycji – zastosowanie w syntezie organicznej” (pop)
- Poster 4: Paulina Sroka Uniwersytet Łódzki „Synteza i badanie właściwości fluoroscencyjnych pochodnych imidowych” (bw)
- Poster 5: Jowita Kras Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki „Regio- i stereoselektywna synteza heterocykli na drodze [3+2] cykloaddycji” (pop)
- Poster 6: Agnieszka Fryźlewicz Politechnika Krakowska „Cykloprzylączenie 1-alkilopodstawionych analogów nitroetenu do wybranych diazowiązków” (bw)
- Poster 7: Marta Kalińska Uniwersytet Gdański „1,4-Dihydropirydyny – otrzymanie i charakterystyka wybranych pochodnych oraz omówienie ich aktywności icznej” (pop)
- Poster 8: Aleksandra Myślak Politechnika Gdańska „Hybrydowe opatrunki na trudno gojące się rany” (bw)
- Poster 9: Dajana Dominiak Uniwersytet Jagielloński „DNA Origami – od sieci DNA do Mona Lisy” (bw)
- Poster 10: Karolina Wronska Uniwersytet Gdański „Synteza 5-azydo-2,3-O-acetylo-1,4-anhydro-D,L-ksylitolu” (bw)

18.09.2021 (SOBOTA) g. 16⁴⁵-17³⁰

SESJA C

- Poster 1: Dawid Faron Uniwersytet Gdański „Proces hydratacji PFS – obliczenia kwantowo-mechaniczne” (bw)
- Poster 2: Kamil Wojtkowiak Uniwersytet Wrocławski „Computational approach to the behaviour of ions and water molecules in artificial membrane channel” (bw)
- Poster 3: Paulina Góra Uniwersytet Jagielloński „Porównanie skuteczności mikroskopii fluorescencyjnej w badaniu niebieskich i popielatoczarznych włókien dżinsowych”
- Poster 4: Marta Wojcieszak Politechnika Poznańska „Podwójne ciecze jonowe jako związki o budowie amfifilowej” (bw)
- Poster 5: Filip Rękas Politechnika Rzeszowska „Modelowanie procesu poliaddycji w układzie dwóch monomerów dwufunkcyjnych” (bw)
- Poster 6: Mateusz Wójtas Uniwersytet Jagielloński „Elektrokatalizatory jako klucz do zrównoważonej produkcji wodoru” (pop)
- Poster 7: Adela Zaręba Uniwersytet Gdański „Tatauje – czym właściwie jest tusz pod naszą skórą?” (pop)
- Poster 8: Natalia Rutkowska Politechnika Łódzka „Antyoksydanty – czy czerwone wino wydłuży nam życie?” (pop)
- Poster 9: Michalina Pieper Uniwersytet Gdański „Olejki eteryczne w kosmetykach” (pop)

19.09.2021 (NIEDZIELA) g. 11^{00-11⁴⁵}
SESJA D

- Poster 1: Brygida Mech Uniwersytet Jagielloński „Proces powstawania i dopuszczania leku do obrotu – jak wygląda w praktyce?” (pop)
- Poster 2: Gabriela Smaga Uniwersytet Jagielloński „Biodruk 3D – przyszłość medycyny regeneracyjnej” (pop)
- Poster 3: Kacper Poblocki Uniwersytet Gdański „Związki kompleksowe jako nowa generacja fotosensybilizatorów w terapii fotodynamicznej (PDT)” (pop)
- Poster 4: Jan Konopka Uniwersytet Jagielloński „Rozwój immunoterapii nowotworowej – rozwój inhibitorów checkpointu immunologicznego PD-1/PD-L1” (pop)
- Poster 5: Emilia Powalka Uniwersytet Łódzki „Hordenina w suplementach diety” (pop)
- Poster 6: Wiktoria Rejmak Uniwersytet Gdański „Katelicydyna LL-37 peptyd antymikrobiotyczny o działaniu terapeutycznym” (pop)
- Poster 7: Milena Sęczkowska Uniwersytet Łódzki „Amantadyna: synteza, właściwości oraz aktywność wobec Covid-19” (pop)
- Poster 8: Weronika Łukaszczyk Uniwersytet Jagielloński „Inteligentne” hydrożele w terapii sztywnej na miarę” (pop)
- Poster 9: Konrad Barnowski Uniwersytet Jagielloński „CBD w leczeniu uzależnienia od kokainy” (pop)
- Poster 10: Katarzyna Bethke Uniwersytet Gdański „Toksyčność karbamazepiny w środowisku o globalnym ociepleniu” (pop)
- Poster 11: Bartosz Ryl Uniwersytet Opolski „Ocena składu chemicznego ekstraktów z kminku zwyczajnego (*Carum carvi* L.) i fenkułu włoskiego (*Foeniculum vulgare* Mill.) i ywności antygrzybowej wobec *Fusarium oxysporum*” (bw)
- Poster 12: Katarzyna Kozak Uniwersytet Warszawski „NTZIP11 – nowy transporter cynku z tytoniu i jego potencjalne wykorzystanie w fitoremediacji” (bw)

19.09.2021 (NIEDZIELA) g. 14^{00-14⁴⁵}
SESJA E

- Poster 1: Patrycja Zdeb Uniwersytet Wrocławski „Czy ściany mogą produkować prąd? Kilka słów na temat modułów BIPV oraz konwerterów spektralnych” (pop)
- poster 2: Alicja Szymba Politechnika Krakowska „Niezwykłe nanocząstki tellurku cynku” (bw)
- Poster 3: Kamil Kwiatkowski Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny „Pierwiastki Ziemi nie tak bardzo Rzadkich” (pop)
- Poster 4: Damian Makowski Uniwersytet Gdański „Synteza Powierzchni Samoczyszczących- Projekt NKCh Klimatyczny” (bw)
- Poster 5: Wiktor Uzar Uniwersytet Jagielloński „Czy zawsze można ufać podręcznikom akademickim?” (pop)
- Poster 6: Agnieszka Manikowska Uniwersytet Gdański „Recykling chemiczny włókien syntetycznych” (pop)
- Poster 7: Mateusz Adam Baluk Uniwersytet Gdański „Wpływ NH₂-UIO-66 (Zr) osadzonych na powierzchni TiO₂ NTs na właściwości fotodegradujące zanieczyszczenia”
- Poster 8: Julianna Wojdyła Uniwersytet Jagielloński „Problematyczna definicja mola” (pop)
- Poster 9: Klaudia Kropidłowska Uniwersytet Gdański „Wpływ antybiotyków na sinicę *Microcystis aeruginosa*” (pop)
- Poster 10: Dominika Skoroszevska Uniwersytet Gdański „Zdrowie ukryte w czekoladzie” (pop)
- Poster 11: Katarzyna Baran Uniwersytet Gdański „Kolorowy zawrót głowy” (pop)

bw - badania własne,

pop - tematy popularnonaukowe

WYKŁADY INAUGURACYJNE

Profesor dr hab. Justyna Brasuń, Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu

„Od linowych do bicyklicznych ligandów peptydowych”

Pani prof. dr hab. Justyna Brasuń jest kierownikiem Katedry i Zakładu Chemii Nieorganicznej na Wydziale Farmaceutycznym Uniwersytetu Medycznego im. Piastów Śląskich we Wrocławiu.

Zainteresowania badawcze Pani Profesor koncentrują się na analizie oddziaływania peptydów oraz ich pochodnych z jonami metali ze szczególnym uwzględnieniem peptydów o strukturze mono- i policyklicznej.

Prezes PROZON Fundacji Ochrony Klimatu - Pan Krzysztof Grzegorzczak

„Wpływ branży chłodniczej na środowisko - 25 lat sieci 3R w Polsce”

PROZON Fundacja Ochrony Klimatu jest samofinansującą organizacją pozarządową, działającą od 25 lat na rzecz ograniczenia emisji gazów szkodliwych dla środowiska, stosowanych w chłodnictwie i energetyce. Założenie Fundacji przez dostawców czynników chłodniczych stanowiło wyraz ich ekologicznej świadomości oraz potrzeby prowadzenia społecznie odpowiedzialnej działalności gospodarczej. Dzięki współpracy z setkami firm serwisowych w Polsce, które dokonują odzysku gazów chłodniczych. Fundacja regeneruje dziesiątki ton gazów cieplarnianych, często również dewastujących warstwę ozonową. Stosowanie czynników pochodzących z odzysku pozwala ograniczyć produkcję nowych szkodliwych gazów.

Fundacja utrzymuje się z usług regeneracji, analiz laboratoryjnych oraz organizacji szkoleń dla branży chłodniczej i energetycznej. Celem nadrzędnym szkoleń jest kreowanie odpowiedzialnych postaw i w konsekwencji ograniczenie emisji szkodliwych gazów. W ramach międzynarodowego konsorcjum REAL Alternatives, Fundacja promuje innowacyjne i bezpieczne rozwiązania w chłodnictwie i klimatyzacji.

W Zgromadzeniu Fundatorów zasiadają firmy: Air Products Sp. z o.o., Linde Gaz Polska Sp. z o.o., Schiessl Polska Sp. z o.o.

PREZENTACJE
BADANIA WŁASNE



Three-dimensional imaging of lyotropic mesophases

Dominika Benkowska-Biernacka¹, Katarzyna Matczyszyn¹

¹*Wroclaw University of Science and Technology, Faculty of Chemistry, Advanced Materials Engineering and Modelling Group, Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

dominika.benkowska@pwr.edu.pl

The common example of lyotropic mesophases is myelin sheath which plays a crucial role in propagation of nerve impulses. The study of this biological membrane gains considerable attention due to unsolved questions about causes of its degradation processes [1]. Here, we present research into formation and imaging of artificial myelin figures (MFs) consisted of phosphatidylcholines in water [2]. Combination of polarized light microscopy and confocal microscopy was applied to investigate lipid-based microstructures. Additionally, two-photon excited fluorescence microscopy was used to observe three-dimensional MFs.

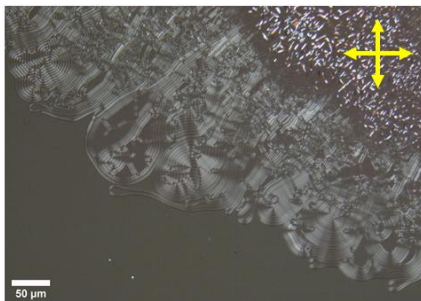


Fig. 1. Myelin structures observed under polarized light microscope. Double arrows illustrate orientation of polarizers [3].

LITERATURE

- [1] B. Zalc, F. Rosie (2018) Myelin: The Brain's Supercharger, Oxford University Press, 2018, 160-188
- [2] D. Benkowska-Biernacka, I. I. Smalyukh, K. Matczyszyn (2020) Morphology of Lyotropic Myelin Figures Stained with a Fluorescent Dye, *J. Phys. Chem. B*, 124, 11974–11979
- [3] D. Benkowska-Biernacka, K. Matczyszyn (2021) Analysis of phospholipid-based lyotropic mesophases, *Bunsenmagazin*, 23, 4, 202-203

Biochemical and nanomechanical analysis of normal and cancer cells of human colon supplemented with vitamin C exposed on ROS by Raman imaging, AFM and fluorescence staining

Karolina Beton¹, Beata Brożek-Pluska¹

*¹Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej
Wróblewskiego 15; 93-590 Łódź*

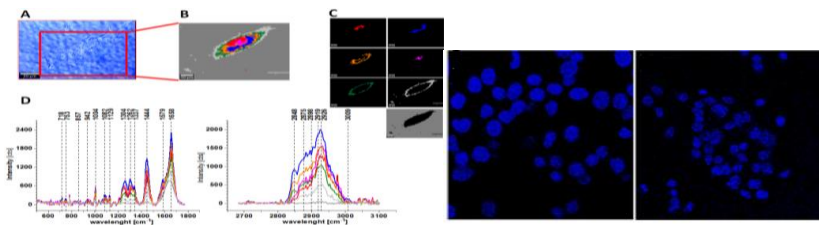
karolina.beton@dokt.p.lodz.pl

In recognition of importance of cancer in worldwide to public health we conducted the research on medical diagnostics of cancer by Raman spectroscopy and imaging and AFM and on influence of reactive oxygen species (ROS) on cancer transformation based on nanomechanical and biochemical properties of human tissues and cells.

Tumor transformation is associated with activation of proto-oncogenes and/or inactivation of suppressor genes or abnormal cell differentiation. More and more data indicate that one of the most important factors responsible for the induction of tumor transformation are ROS. At the same time, ROS production is a natural part of oxygen metabolism. The balance between the production of ROS and the efficiency of antioxidant systems prevent oxidative stress and subsequent damage to important macromolecules such as DNA, proteins and lipids.

Spectroscopic and microscopic methods allow the fast, precise and unambiguous differentiation of healthy and cancerous biological samples. Moreover, a very important advantage of Raman spectroscopy is ability to identify many individual components of biological samples in one measurement that help in their differentiation. Based on Raman spectra and with additional using of fluorescence staining method cell structures can be visualized.

Statistically assisted analysis of Raman spectra and AFM data such as: stiffness, Young modulus shows that normal and cancerous human cells can be distinguished based on their unique vibrational and nanomechanical properties.



This work was supported by the National Science Centre of Poland (Narodowe Centrum Nauki) UMO-2017/25/B/ST4/01788.

Elektrochemia jako narzędzie do analizy substancji domieszkujących narkotyki

Paulina Borgul¹, Karolina Sobczak¹, Patrycja Pawlak¹, Konrad Rudnicki¹, Sławomira Skrzypek¹, Łukasz Półtorak¹

¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, Zakład Elektroanalizy i Elektrochemii; ul. Tamka 12, 91-403 Łódź

paulina.borgul@chemia.uni.lodz.pl

Badanie elektroanalityczne próbek ulicznych komplikuje obecność substancji znanych jako (z ang.) *cutting agents*. Te związki chemiczne mogą zakłócać wykrywanie substancji odurzających, a tym samym wpłynąć na wyniki analizy. Substancje domieszkujące są dodawane do próbek ulicznych z kilku powodów, takich jak (i) zwiększenie zysków sprzedawców narkotyków, ponieważ zmniejsza się ogólna zawartość narkotyku, (ii) wpływ na działanie farmakologiczne narkotyku oraz (iii) wpływ na badanie przesiewowe niektórych mieszanin, a co za tym idzie utrudnione wykrywanie substancji odurzających. Substancje chemiczne często stosowane jako substancje domieszkujące to talk, mleko w proszku, skrobia, cukry, ale także aktywne środki przeciwbólowe, stymulanty, środki nootropowe czy antyalergiczne.[1]

W niniejszych badaniach kompleksowo przebadaliśmy 23 substancje znane jako *cutting agents* kokainy na spolaryzowanej granicy cieczowej utworzonej pomiędzy wodnym roztworem chlorku sodu lub buforu Brittona Robinsona (BRB), a tetrakis(4-chlorofenylo)boranem bis(trifenylfosforanyliden)amoni (BTTPATPBCl) rozpuszczonym w 1, 2-dichloroetan.[2][3][4] Badane związki chemiczne obejmowały cukry, sole nieorganiczne, kwasy nieorganiczne i związki organiczne. Z wykorzystaniem voltamperometrii przenoszenia jonów wyznaczyliśmy i obliczyliśmy szereg parametrów elektrochemicznych, elektroanalitycznych i fizykochemicznych. Otrzymane wyniki posłużą do opracowania czujników opartych na spolaryzowanych granicach cieczowych do wykrywania kokainy w próbkach (proszkach) ulicznych.

Projekt został wsparty finansowo ze środków Narodowego Centrum Nauki w Krakowie (Grant no. UMO-2018/31/D/ST4/03259)

LITERATURA

- [1] European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction and Europol, 2019
- [2] Półtorak, L., Gamero-Quijano, A., Herzog, G. & Walcarius, A. Decorating soft electrified interfaces: From molecular assemblies to nano-objects. *Appl. Mater. Today* 9, 533–550 (2017).
- [3] Liu, S., Li, Q. & Shao, Y. Electrochemistry at micro- and nanoscopic liquid/liquid interfaces. *Chem. Soc. Rev.* 40, 2236–2253 (2011).
- [4] [3] Borgul, P. et al. Ephedrine sensing at the electrified liquid-liquid interface supported with micro-punched self-adhesive polyimide film. *Sensors Actuators B Chem.* 4005, 130286 (2021).

Modyfikacja elastomerów pod kątem poprawy ich adhezji do srebra

Joanna Chudzik¹, Dariusz M. Bieliński¹, Grzegorz Celichowski²

¹ Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Technologii Polimerów i Barwników, Stefanowskiego 12/16, 90-924 Łódź

² Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii i Technologii Materiałów, ul. Pomorska 163, 90-236 Łódź

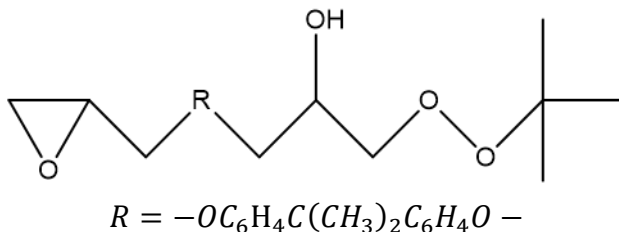
joanna.chudzik@dokt.p.lodz.pl

Kompozyty polimerowe na bazie nanodrutów srebra (AgNW) ze względu na swoje unikalne właściwości (w szczególności optyczne oraz przewodzące), cieszą się obecnie dużą popularnością. Mimo to nanokompozyty AgNW na bazie podstawowych kauczków, takich jak kauczuk butadienowo – styrenowy (SBR), butadienowo – akrylonitrylowy (NBR) czy karboksylowany kauczuk butadienowo – akrylonitrylowy (XNBR) nie znajdują się w centrum zainteresowania naukowców. Powodem może być słaba adhezja pomiędzy AgNW a materiałami polimerowymi, która w przypadku elastomerów stanowi dużo większy problem, niż ma to miejsce w przypadku termoplastów.

Opisane prace skupiają się na poprawie adhezji poprzez: modyfikację AgNW, zmiany w sposobie otrzymywania kompozytów i (w szczególności) modyfikację kauczków.

W celu modyfikacji kauczków zastosowano dwie żywice: mononadtlenkową pochodną eteru diglicydyłowego bisfenolu A (PO) oraz jej oligomer nadtlenowy zawierający grupy karboksylowe (CPO), a także dwa polimery: poliwinylpiperolidon (PVP) i polidopaminę (PDA). Każda z tych modyfikacji miała na celu poprawienie adhezji nanodrutów srebra do matrycy polimerowej oraz zmianę właściwości mechanicznych matrycy (pod kątem przyszłych zastosowań). Oba te cele zostały osiągnięte.

W ramach modyfikacji podłoży polimerowych została również zastosowana modyfikacja przy pomocy rozpuszczalników: acetonu, alkoholu etylowego oraz toluenu. Badano wpływ przetarcia oraz zanurzenia przez czas 1h w danym rozpuszczalniku na tendencję AgNW do wnikania w strukturę polimeru. Wyschnięte kompozyty warstwowe zbadano przy pomocy testu adhezji tape test. Wyniki dały przesłanki by sądzić, iż ten typ modyfikacji, przy odpowiednio dobranych warunkach, może przynieść zamierzone skutki.



Rys. 1. Mononadtlenkowa pochodna eteru diglicydyłowego bisfenolu A (PO)

Ocena stabilności wybranych hydroksypochodnych wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych w próbkach środowiskowych

Justyna Durak¹, Katarzyna Styszko¹, Elżbieta Sochcka-Tatara²

¹*Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, Wydział Energetyki i Paliw, Katedra Chemii Węgla i Nauk o Środowisku, al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków*

²*Uniwersytet Jagielloński - Collegium Medicum, Katedra Epidemiologii i Medycyny Zapobiegawczej, ul. Kopernika 7a, 31-034 Kraków*

judurak@agh.edu.pl

Wśród zanieczyszczeń powietrza obok pyłu zawieszzonego, tlenków azotu, metali ciężkich, tlenku węgla, czy dwutlenku siarki wyróżnia się również wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne (WWA). WWA to węglowodory aromatyczne z dwoma lub więcej skondensowanymi pierścieniami benzenowymi w różnych konfiguracjach strukturalnych. Związki te są szeroko rozpowszechnionymi zanieczyszczeniami środowiska powstałymi w wyniku niepełnego spalania materiałów organicznych. WWA po wniknięciu do organizmu ludzkiego są metabolizowane do hydroksypochodnych (OH-WWA) i wydalane wraz z moczem i kałem. Z racji łatwości uwalniania OH-WWA do wydaliny ludzkiej uznaje się OH-WWA za biomarkery ekspozycji na WWA.

Opracowano metodę oznaczania wybranych OH-WWA (1-hydroksypiren, 2-hydroksyfluoren, 2-hydroksynaftalen) poprzez wykorzystanie wysokosprawnej chromatografii cieczowej z detektorem spektrofotometrycznym UV-Vis (HPLC/UV-Vis). Zakłada się, że stężenia OH-WWA w próbkach środowiskowych będą na poziomie ng/L - µg/L, co wymogło opracowanie procedury zatężania próbek poprzez ekstrakcję do fazy stałej. Celem badań była ocena stabilności wybranych OH-WWA, aby ocenić, czy podczas transportu ścieków od momentu ich wejścia do systemu kanalizacyjnego do ich analizy w laboratorium. Eksperyment odbył się równolegle dla dwóch matryc (wody dejonizowanej i ścieków rzeczywistych) z dodatkiem wzorców analitów. Zasymulowano warunki panujące w kanalizacji w okresie letnim i zimowym poprzez przeprowadzenie testów w temperaturze 22°C i 4°C. Czas trwania eksperymentu to 72 godziny. Testy stabilności wykazały, że niezależnie od panujących warunków, stężenia wybranych OH-WWA pozostają niezmiennie. Uważa się, że analiza próbek środowiskowych powinna odbyć się w czasie nie dłuższym niż trzy dni od momentu opuszczenia organizmu ludzkiego przez OH-WWA.

Praca sfinansowana z Subwencji Badawczej AGH 16.16.210.476

Opis natury oddziaływań w pochodnych naftalenu oraz naftochinonu metodami modelowania molekularnego

Beata Kizior¹, Bartłomiej M. Szyja¹, Aneta Jezierska², Jarosław J. Panek²

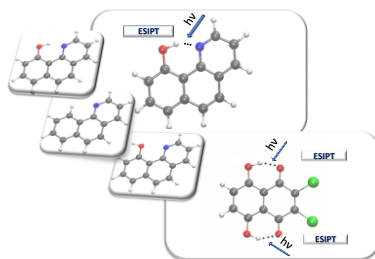
¹ Politechnika Wroclawska, Katedra Chemii i Technologii Paliw, Wydział Chemiczny, ul. Gdańska 7/9 50-344 Wrocław, Polska

² Uniwersytet Wroclawski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

beata.kizior@pwr.edu.pl

Od dawna opis natury oddziaływań związków pierścieniowych stanowi interesujący temat wielu badań, gdyż oddziaływania międzycząsteczkowe decydują o procesie samoorganizacji cząsteczek w strukturach krystalicznych. Ma to duże znaczenie w dziedzinie inżynierii krystalicznej. Głównym celem prezentowanych badań jest porównanie właściwości fizyko-chemicznych pochodnych naftalenu oraz naftochinonu (Rys. 1) [1,2] w dwóch stanach elektronowych.

W czasie wykładu zostaną omówione wyniki otrzymane dla elektronowego stanu podstawowego opisujące strukturę elektronową rozpatrywanych układów wykonanych w ramach teorii AIM (*Atoms in Molecules*) [3], a także analizy aromatyczności pierścieni. W dalszej części wykładu zostaną zaprezentowane rezultaty symulacji wykonanych w elektronowym stanie wzbudzonym opartej na teorii funkcjonału gęstości zależnej od czasu (TD-DFT), która ujawniła występowanie zjawiska ES IPT (*Excited State Intramolecular Proton Transfer*) dla 10-hydroksybenzochinolini oraz dimeru benzo[h]chinolina-2-metylorezorcynolu. Wykład podsumuje opis dekompozycji energii badanych struktur otrzymany za pomocą metody SAPT [5].



Rys. 1. Modele związków wziętych do badań.

Autorzy dziękują Wroclawskiemu Centrum Sieciowo-Superkomputerowemu (WCSS), Akademickiemu Centrum Komputerowemu Cyfronet (AGH) (PL-Grid Prometheus) oraz Akademickiemu Centrum Komputerowemu (TASK) w Gdańsku za czas obliczeniowy i wszelką pomoc w trakcie realizacji projektu.

LITERATURA

- [1] Beata Kizior, Jarosław J. Panek, Bartłomiej M. Szyja, Aneta Jezierska (2021) Structure-Property Relationship in Selected Naphtho- and Anthraquinone Derivatives on the Basis of Density Functional Theory and Car-Parrinello Molecular Dynamics. *Symmetry* 13: 564/1-564/18.
- [2] Aneta Jezierska, Beata Kizior, Bartłomiej M. Szyja, Jarosław J. Panek (2021) On the nature of inter- and intramolecular interactions involving benzo[h]quinoline and 10-hydroxybenzo[h]quinoline: Electronic ground state vs excited state study. *J. Mol. Struct.* 1234: 130126/1-130126/11.
- [3] Richard F.W. Bader (1990) *Atoms in molecules: a quantum theory*. Oxford University Press, Oxford.
- [5] Bogumił Jezierski, Robert Moszyński, Krzysztof Szalewicz (1994) Perturbation Theory Approach to Intermolecular Potential Energy Surfaces of van der Waals Complexes. *Chem. Rev.* 7: 1887-1930.

Charakterystyka właściwości fizykochemicznych i ich związków z aktywnością biologiczną pochodnych penicyliny i antybiotyków glikopeptydowych w oparciu o wybrane metody modelowania molekularnego

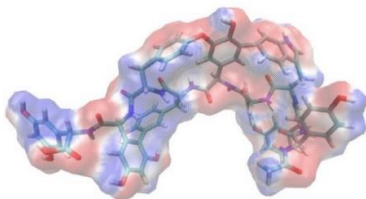
Katarzyna Krupka¹, Aneta Jezierska¹

¹ Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

307313@uwr.edu.pl

Antybiotykooporność bakterii stanowi poważny problem we współczesnej ochronie zdrowia. Dotychczas antybiotyki takie jak ureidopenicyliny, karboksypenicyny, czy wankomycyna stanowiły rozwiązanie tego problemu. Jednak ze względu na wzrastający stopień lekooporności mikroorganizmów ważne jest, aby poszukiwać nowych substancji antybakteryjnych. Obecnie nadzieję na walkę z antybiotykoopornymi bakteriami stanowią odkryte w 2020 roku dwa nowe glikopeptydy: korbomycyna i komplestatyna [1], które wykazały obiecującą aktywność bakteriostatyczną wobec szczepów opornych. W niniejszych badaniach skoncentrowano się na związku właściwości fizykochemicznych pochodnych penicylin oraz antybiotyków glikopeptydowych z ich aktywnością biologiczną.

Symulacje kwantowo-chemiczne wykonano w oparciu o Teorię Funkcjonału Gęstości (DFT) z uwzględnieniem ciągłego modelu rozpuszczalnikowego (PCM). Otrzymane w wyniku obliczeń struktury stały się bazą do sporządzenia map potencjałów elektrostatycznych, które zestawiono z właściwościami istotnymi dla aktywności biologicznej obliczonymi za pomocą narzędzia Molinspiration [2].



Rys. 1. Mapa potencjałów elektrostatycznych cząsteczki korbomycyny.

LITERATURA

- [1] Culp EJ, Wagelchner N, Wang W, Fiebig-Comyn AA, Hsu Y-P, Koteva K, Sychantha D, Coombes BK, Van Nieuwenhze MS, Brun YV, Wright GD (2020) Evolution-guided discovery of antibiotics that inhibit peptidoglycan remodeling. *Nature* 578: 582-587
- [2] Molinspiration Cheminformatics free web services, <https://www.molinspiration.com>, Slovensky Grob, Slovakia
- [3] Lipinski CA (2004) Lead- and drug-like compounds: the rule-of-five revolution. *Drug Discov Today Technol* 1: 337-341
- [4] Veber DF, Johnson SR, Cheng H-Y, Smith BR, Ward KW, Kopple KD (2002) Molecular Properties That Influence the Oral Bioavailability of Drug Candidates *J Med Chem* 45: 2615-2623

Wykorzystanie obliczeń DFT, spektroskopii impedancyjnej, TG i XRD do opisu procesu dehydroksylacji smektytu

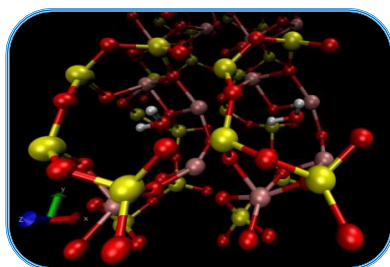
Karol Kulacz¹, Bartłomiej Szyja ², Kazimierz Orzechowski¹

¹*Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, F. Joliot Curie 14, 50-383 Wrocław*

²*Katedra Chemii i Technologii Paliw, Politechnika Wroclawska, ul. Gdańska 7/9, 50-344 Wrocław*

karol.kulacz@chem.uni.wroc.pl

Smektyty to grupa minerałów ilastych o budowie warstwowej. Pojedynczy pakiet mineralny stanowią dwie warstwy silikatowe oddzielone jedną gibsytową. W przestrzeniach międzypakietowych w naturalnym środowisku zgromadzona jest woda. Interkalacja minerału polega na wprowadzaniu polarnych cząsteczek do przestrzeni międzypakietowych. Modyfikacje minerałów ilastych poprzez interkalacje umożliwiają otrzymywanie materiałów o nowych właściwościach i o potencjalnym zastosowaniu, jako np. materiały ekranujące pola elektromagnetyczne.[1] Woda międzypakietowa ulega usunięciu na skutek ogrzania minerału. Proces dehydratacji rozpoczyna się w 50°C, a kończy ~150°C [2]. W wyższych temperaturach (220°C – 1000°) dochodzi do dehydroksylacji, czego konsekwencją jest stopniowa utrata właściwości interkalacyjnych.



Rys. 1. Model obliczeniowy, warstwowa struktura smektytu.

Materiał badawczy stanowił montmorylonit (MMT) i nontronit (NNT), grupa smektytu. Wykazano, że MMT ogrzany do temperatury ~225°C częściowo traci zdolność do wiązania wody, w przypadku nontronitu zmiany te zachodzą po przekroczeniu temperatury 350°C. Na podstawie obliczeń DFT wykazano, że korzystniejsza energetycznie jest ścieżka procesu usunięcia grup –OH zachodząca wewnątrz pakietu mineralnego. Wyznaczone wartości energii aktywacji potwierdzają, że proces dehydroksylacji zachodzi w wysokich temperaturach.

Autorzy dziękują Wrocławskiemu Centrum Sieciowo-Superkomputerowemu (WCSS) we Wrocławiu oraz Akademickiemu Centrum Komputerowemu Cyfronet AGH (infrastruktura PL-Grid Prometheus) w Krakowie za hojny przydział czasu obliczeniowego i wsparcie techniczne.

LITERATURA

- [1] K. Kulacz, K. Orzechowski, Dalton Trans. 48 (2019) 3874–3882.
[2] K. Kulacz, J. Waliszewski, S. Bai, L. Ren, H. Niu, K. Orzechowski, Appl. Clay Sci., 202 (2021) 105952.

Biosynteza i oczyszczanie rekombinowanego białka łącznikowego bakteriofaga TP-84

Patrycja Laszuk^{1,2}, Małgorzata Witkowska¹, Aneta Szymańska³, Agnieszka Żylicz - Stachula¹

¹ Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Biotechnologii Molekularnej ul. Wita Stwosza 63, 80-306 Gdańsk

² Bałtyckie Stowarzyszenie Chemików

³ Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Biomedycznej ul. Wita Stwosza 63, 80-306 Gdańsk

patrycja.laszuk@phdstud.ug.edu.pl

Bakteriofagi są to wirusy, które charakteryzują się wysoką specyficznością względem gospodarza, którym jest komórka prokariotyczna. Gospodarzem bakteriofaga TP-84 są niektóre termofilne szczepy bakterii *Geobacillus stearothermophilus* [1].

Wirusowe białka strukturalne mają zdolność spontanicznej agregacji, a w wyniku tego procesu powstają nanobiostruktury określane jako cząsteczki wirusopodobne (ang. *virus-like particles*, VLPs). Takie struktury wykorzystywane są w medycynie i biotechnologii m.in. jako nośniki substancji aktywnych oraz do tworzenia szczepionek nowej generacji.

Celem przedstawionych badań była biosynteza rekombinowanego białka łącznikowego bakteriofaga TP-84 w dwóch wariantach: *i*) z oraz *ii*) bez etykiety His-tag; w *Escherichia coli* oraz opracowanie metody oczyszczania.

Sekwencja DNA natywnego genu, kodującego białko łącznikowe bakteriofaga TP-84, została zoptymalizowana pod względem ekspresji w bakterii *Escherichia coli* i wklonowana do odpowiedniego wektora ekspresyjnego.

Uzyskane konstrukty sprawdzono pod względem poprawności sekwencji rekombinowanego genu oraz jego ekspresji w hodowlach na małą i dużą skalę. Biosynteza rekombinowanego białka łącznikowego została potwierdzona za pomocą rozdziału białek w żelu denaturującym SDS-PAGE, techniki western blotting oraz immunodetekcji z przeciwciałami anty-His. Uzyskane osady bakteryjne poddano lizie, a następnie białko z etykietą His-tag oczyszczano za pomocą chromatografii metalopowinowactwa, natomiast rekombinowane białko bez etykiety oczyszczano z wykorzystaniem etapów denaturacji cieplnej natywnych białek *E. coli*, wysalania siarczanem amonu oraz sączenia molekularnego.

Oczyszczone białka zostaną przeznaczone na badania konformacyjne.

Badania finansowane ze środków projektu pt. „Systemy nowej generacji dostarczania molekuł bioaktywnych w syntetyzowanych chemicznie i poddanych inżynierii genetycznej nanobiomaterialach” (akronim BIONANOVA) umowa nr TECHMATSTRATEG2/410747/11/NCBR/2019

LITERATURA

[1] Skowron PM, Kropinski AM, Zebrowska J, Janus L, Szemiako K, Czajkowska E, Maciejewska N, Skowron M, Łoś J, Łoś M, Żylicz-Stachula A. “Sequence, genome organization, annotation and proteomics of the thermophilic, 47.7-kb *Geobacillus stearothermophilus* bacteriophage TP-84 and its classification in the new Tp84virus genus”, PLoS One. (2018) 6;13(4):e0195449.

Noble metal nanoplate-mediated photothermal therapy

María C. Nevárez Martínez¹, Sebastian Mahlik², Adriana Zaleska-Medynska¹

¹Department of Environmental Technology, Faculty of Chemistry, University of Gdansk, 80-308 Gdansk, Poland

²Institute of Experimental Physics, Faculty of Mathematics, Physics and Informatics, University of Gdansk, 80-308 Gdansk, Poland

maria.nevarezmartinez@phdstud.ug.edu.pl

New strategies towards cancer theranostics have been investigated throughout the last decades, being photothermal therapy (PTT) a selective approach compared to conventional treatments. It allows to kill cancer cells in the hyperthermia range of 41–47 °C, by applying heat resulting from the efficient conversion of near infrared (NIR) light under the presence of photothermal conversion agents (PTAs) with ability to accumulate in tumor tissues [1]. Noble metal nanoparticles constitute PTAs of great interest because of their absorption in the IR region and biocompatibility [2]. Tuning the properties of nanomaterials is achievable through variations of the synthesis method [3]; that way, this work presents the preparation of noble metal nanoparticles, namely Au and Pt porous nanoplates, prepared by galvanic replacement [4] and their photothermal conversion assessment under irradiation of NIR light (808 and 980 nm laser).

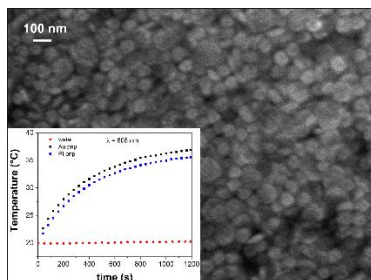


Fig. 1. SEM images of Au porous nanoplates. The inset presents the heating curves for Au and Pt porous nanoplates with water as blank ($\lambda = 808 \text{ nm}$).

This work was supported by the National Science Centre within the Preludium grant Novel nanomaterials based on titanium composites conjugated with antibody molecules with potential photothermal conversion application. 2019/35/N/ST5/00464

LITERATURA

- [1] X. Huang, P.K. Jain, I.H. El-Sayed, M.A. El-Sayed, Plasmonic photothermal therapy (PPTT) using gold nanoparticles, *Lasers Med Sci.* 23 (2008) 217–228.
- [2] W. Wei, X. Zhang, S. Zhang, G. Wei, Z. Su, Biomedical and bioactive engineered nanomaterials for targeted tumor photothermal therapy: A review, *Mater Sci Eng C Mater Biol Appl.* 104 (2019) 109891.
- [3] A.C. V Doughty, A.R. Hoover, E. Layton, C.K. Murray, E.W. Howard, W.R. Chen, Nanomaterial Applications in Photothermal Therapy for Cancer, *Mater.* 12 (2019).
- [4] S. Kang, W. Shin, K. Kang, M.H. Choi, Y.J. Kim, Y.K. Kim, D.H. Min, H. Jang, Revisiting of Pd Nanoparticles in Cancer Treatment: All-Round Excellence of Porous Pd Nanoplates in Gene-Thermo Combinational Therapy, *ACS Appl Mater Interfaces.* 10 (2018) 13819–13828.

Badania interakcji rekombinantowych białek z dedykowanymi bioczułnikami z wykorzystaniem technologii Blitz

Maciej Prusinowski¹, Joanna Żebrowska¹, Daria Krefft¹, Małgorzata Ponikowska¹, Marta Prusinowska¹, Klaudia Jędryś¹, Natalia Górecka¹, Piotr Skowron¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Biotechnologii Molekularnej

maciej.prusinowski@ug.edu.pl

Białka w organizmach żywych pełnią ważne i różnorodne funkcje. Są kluczowymi związkami w większości procesów komórkowych, a ich funkcje często zależą od oddziaływań z innymi białkami lub molekułami. Opracowanie dokładnych metod badań tych oddziaływań w komórkach są więc niezwykle istotne [1, 2]. Przedstawiamy wyniki serii pomiarów oddziaływań kinetycznych rekombinantowych białek z wybranymi biocząsteczkami. Pomiaru kinetyczne oddziaływań białko-ligand zostały wykonane przy użyciu techniki Label-free Assays in a Drop przy użyciu aparatu Blitz® od firmy ForteBio. Głównymi zaletami charakteryzującą wybraną technikę to możliwość pomiarów w czasie rzeczywistym, szeroki zakres pomiarów, brak niebezpiecznych znaczników takich jak radioizotopy, niewielka ilość próbki niezbędnej do pomiarów. Ponadto daje możliwość analizowania różnych oddziaływań, w tym białko-białko, białko-przeciwciało gwarantowane przez zastosowanie specjalistycznych biosensorów [3]. Do pomiarów wykorzystano białka rekombinantowe, uzyskane z nadekspresji z zaprojektowanych i optymalizowanych pod względem kodonów genach syntetycznych w ekspresyjnym systemie *Escherichia coli*. Białka oczyszczono metodami chromatografii powinowactwa. Białka te wykazują selektywne właściwości do oddziaływań z różnymi biocząsteczkami. Użyto m.in. hTRF1_His z kompleksu Shelterin, które wykazuje zdolności do wiązania się do telomerowego DNA. W oddziaływaniach kinetycznych pomiędzy białkiem-DNA wykorzystano liniowy fragment DNA o wielkości 165 pz zawierający 2 powtórzenia telomerowe. Ponieważ wszystkie otrzymane białka posiadały etykietę His, do pomiaru oddziaływania wykorzystano biosensory His1k, aby móc unieruchomić białka na sensorze. Potwierdzono zdolność otrzymanych rekombinantowych białek do selektywnego wiązania się z określonymi cząsteczkami, na przykład telomerowym DNA. Wyznaczono stałe szybkości i powinowactwa dla oddziaływań wiązania (k_a , k_d , K_D).

Projekt jest finansowany z umowy: Nr. TECHMATSTRATEG2/410747/11/NCBR/2019. Tytuł projektu: „Systemy nowej generacji dostarczania molekuł bioaktywnych w syntetyzowanych chemicznie i poddanych inżynierii genetycznej nanobiomateriałach.” Akronim BIONANNOVA. Nazwa konkursu: II konkurs w ramach strategicznego programu badań naukowych i prac rozwojowych „nowoczesne technologie materiałowe” TECHMATSTRATEG

LITERATURA

- [1] Alberts B, Johnson A, Lewis J, Morgan D, Martin R, Roberts K, Walter P (2014) Molecular Biology of the Cell. 6th edition. Garland Science
- [2] Srinivasa Rao V, Srinivas G, Sujini N, Sunand Kumar G. N, (2013) Protein-Protein Interaction Detection: Methods and Analysis. Hindawi Publishing Corporation International Journal of Proteomics Volume 2014(12)
- [3] Sultana A, Lee J. E, (2015) Measuring Protein-Protein and Protein-Nucleic Acid Interactions by Biolayer Interferometry. Current Protocols in Pharmacology 9:19(25)1-19

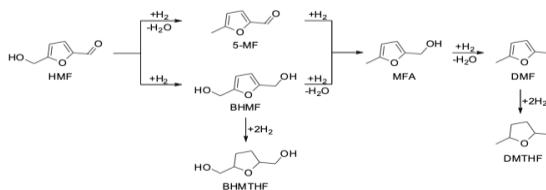
Wpływ właściwości nośnika oraz dodatku żelaza naaktywność katalizatorów niklowych na tlenku tytanu (IV) w reakcji uwodornienia 5-hydroksymetylofurfuralu

Martyna Przydacz¹, Marcin Jędrzejczyk¹, Agnieszka Ruppert¹

¹Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej
ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź

przydacz.martyna@gmail.com

Biomasa lignocelulozowa jest nieograniczonym źródłem prostych cząsteczek tzw. *platform molecules*, które mogą być zastosowane jako bloki budulcowe do otrzymania innych wartościowych przemysłowo związków chemicznych. Jednym z tych obiecujących związków jest 2,5-dimetylofuran (DMF), który jak dotąd był otrzymywany głównie w wyniku uwodornienia 5-hydroksymetylofurfuralu (HMF) przeprowadzanego przy udziale katalizatorów opartych na metalach szlachetnych. Jednak tańsze metale nieszlachetne również wykazują aktywność w reakcjach uwodornienia wartościowych związków pochodzących z biomasy.



Schemat 1. Schemat reakcji uwodornienia 5-hydroksymetylofurfuralu.

W przypadku przekształcenia HMF do DMF pojawiają się co najmniej dwie możliwe ścieżki reakcyjne prowadzące do wielu produktów uwodornienia (*Schemat 1.*). Stąd kluczowy był dobór katalizatora zapewniającego wysoką selektywność. Jako fazę aktywną katalizatora zastosowano nikiel będący alternatywą dla metali szlachetnych, zaś jako nośnik tlenek tytanu. W celu zbadania wpływu właściwości nośnika takich jak: wielkość powierzchni właściwej, rozmiaru krystalitów oraz stosunku anatazu do rutyłu na przebieg reakcji przygotowano szereg katalizatorów opartych na różnych tlenkach tytanu. Zaobserwowano, że nośniki zawierające rutil faworyzują ścieżkę reakcji prowadzącą przez 2,5-bis-hydroksymetylofuran (BHMf) pozwalając na powstanie produktu redukcji pierścienia aromatycznego, zaś nikiel osadzony na wysokopowierzchniowym anatazie daje wysoką wydajność do DMF.

W następnym etapie skład fazy metalicznej był modyfikowany poprzez dodatek żelaza. Wpływa ono na dyspersję i redukowalność niklu, co pozwoliło na znaczną poprawę wydajności do DMF (z 10 do 71%).

Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki.

Mikroplatformy na bazie kapilar krzemionkowych jako sensory w ilościowym oznaczeniu chininy w toniku

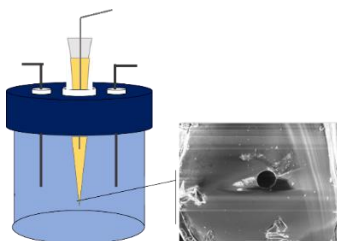
Karolina Sobczak¹, Konrad Rudnicki¹, Sławomira Skrzypek¹, Łukasz Półtorak¹

¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Zakład Elektroanalizy i Elektrochemii
u. Tamka 12, 91 -403 Łódź

karolina.sobczak3@edu.uni.lodz.pl

Chinina (QN) to naturalny alkaloid, po raz pierwszy wyekstrahowany z kory południowoamerykańskiego drzewa chinowego. Do II Wojny Światowej była lekiem przeciwmalarycznym pierwszego wyboru, jednak wraz z rozwojem nauki i techniki zaczęto zauważać jej coraz większe działanie uboczne. Alkaloid ten stosowany jest także jako aromat smakowy w przemyśle spożywczym, zwłaszcza w napojach typu tonik. Maksymalna dopuszczalna zawartość to 7.5 ml chlorowodoru QN na 100 ml napoju.

W ostatnich latach coraz częściej słyszymy o nieuczciwych sztuczkiach producentów, głównie z branży spożywczej i farmaceutycznej związanej z fałszowaniem składów produktów. Tak ważnym jest więc ciągle poszukiwanie nowych, tanich, szybkich i czułych metod pozwalającej na oznaczenie wybranych substancji. Nasza metoda opiera się na elektrochemii cieczowych granic fazowych (ITIES) w połączeniu z voltamperometrią przeniesienia jonu (ITV). ITIES daje coraz więcej nowych możliwości, gdzie jedną z nich jest możliwość taniej i prostej miniaturyzacji układów pomiarowych. W tej pracy przedstawiono możliwość jednej z technik miniaturyzacji spolaryzowanych granic cieczowych (Rys. 1) do oznaczenia QN w trzech próbkach toniku zakupionych od niezależnych producentów [1].



Rys. 1. Schemat naczynka voltamperometrycznego stosowanego w badaniach QN na zminiaturyzowanych granic cieczowych wraz ze zdjęciem SEM wytworzonego poru.

Badania były przeprowadzone w ramach projektu PRELUDIUM 15 Narodowego Centrum Nauki (NCN) w Krakowie (Projekt nr UMO–2018/29/N/ST4/01054).

LITERATURA

[1] K. Rudnicki*, K. Sobczak, P. Borgul, S. Skrzypek, L. Półtorak**, „Determination of quinine in tonic water at the miniaturized and polarized liquid–liquid interface”; *Food Chem.* 364 (2021) 130417

Wpływ preparatyki katalizatorów niklowych na aktywność w reakcji uwodornienia kwasu lewulinowego do γ -walerolaktonu

Emilia Soszka¹, Marcin Jędrzejczyk¹, Agnieszka M. Ruppert¹

¹Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej
ul. Zeromskiego 116, 90-924 Łódź

e.soszka1991@gmail.com

Biomasa lignocelulozowa jest jednym z najczęściej wykorzystywanych odnawialnych surowców ze względu na m.in. dostępność na dużą skalę oraz niski koszt. Rozwój technologii wykorzystywania tego surowca skupia się głównie na produkcji biopaliw, produkcji związków chemicznych i energii. Wśród produktów otrzymywanych z biomasy można wymienić m.in. γ -walerolakton (GVL) uważany za istotny dodatek biopaliwowy. GVL można uzyskać poprzez redukcję kwasu lewulinowego (LA) z użyciem katalizatora.

Nasze ostatnie badania wykazały, że katalizatory zawierające nikiel wykazują wysoką aktywność w reakcji uwodornienia. W celu zwiększenia wydajności katalitycznej, stabilności oraz odporności na zatrucia rozważono kilka rozwiązań, takich jak dodanie innych metali do katalizatorów Ni, zastosowanie różnych sposobów syntezy oraz optymalizację składu katalizatora. Dodatek palladu do Ni/ γ -Al₂O₃ pozwolił uzyskać najwyższą aktywność spośród wszystkich metali szlachetnych zastosowanych jako dodatki (Pd, Pt, Ru, Rh). Stwierdzono, że możliwe jest kontrolowanie aktywności katalitycznej w większym stopniu poprzez optymalizację metody otrzymywania. Za kluczowe czynniki wpływające na aktywność katalizatora uznano zastosowanie prekursora chlorkowego podczas preparatyki katalizatora oraz wysoką temperaturę obróbki przygotowanego materiału. Obecność jonów chlorkowych ułatwia redukcję Ni-Pd (TPR) oraz poprawia dyspersję metali na powierzchni katalizatora, o czym świadczy wysoka intensywność jonów Ni i Pd (badanie ToF-SIMS) i obecność niewielkich krystalitów niklu (TEM-EDX). Dodatek chloru podczas syntezy katalizatorów może również ograniczyć powstawanie stopu Ni-Pd. W przeciwieństwie do katalizatorów otrzymanych z prekursorów azotanowych, stwierdzono powstawanie spineli Ni po obróbce w wysokiej temperaturze (XRD) oraz zaobserwowano obecność dużych agregatów Pd (TEM-EDX). Przeprowadzone badania wykazały, że wysoką aktywność katalizatorów bimetalicznych przygotowanych w obecności jonów chlorkowych można przypisać synergistycznemu oddziaływaniu Ni-Pd oraz osłabieniu oddziaływania metalu z nośnikiem, a także wzrostowi dyspersji metali.

Projekt został sfinansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach projektu SONATA BIS (UMO-2016/22/E/ST4/00550).

LITERATURA

[1] E.Soszka, H.M. Reijneveld, M. Jędrzejczyk, I. Rzeźnicka, J. Grams, A.M. Ruppert (2018) ACS Sustainable Chem. Eng. 6, 14607–14613.

Catalysis of the Z-E Isomerization of Azobenzene by Gold Nanorods

Nina Tarnowicz-Staniak¹, Marek Grzelczak², Katarzyna Matczyszyn¹

¹ *Advanced Materials Engineering and Modelling Group,
Wroclaw University of Science and Technology, Wroclaw, Poland*

² *Centro de Física de Materiales (CSIC-UPV/EHU), Donostia-San Sebastian, Spain*

nina.tarnowicz@pwr.edu.pl

Photocatalytic influence of Au nanoparticles has been studied for 40 years now, due to the good theoretical description of the process. [1] We presented our insight into the topic of plasmon-assisted photocatalysis during *II Pomorskie Studenckie Sympozjum Chemiczne*, when we reported the bio-inspired regeneration of cofactor molecules (NAD⁺) under Vis-IR irradiation, catalysed by the use of AuPd bimetallic nanoparticles immobilized on the cellulose fibers. [2]

However, irradiation is not necessary and gold nanoparticles can also influence reactions in the dark, as it has been shown e.g. for the Z-E isomerization of azobenzenes. [3-5] Presence of Au nanoparticles can positively affect the thermal recovery of the photochromic molecules and increase the rate constant values describing the process. [3] This is possible due to the electron transfer from the photochromic molecule (azobenzene) to the nanoparticle and formation of radical cation intermediate that further undergoes the Z-E isomerization. Reaction is instantaneously followed by the electron transfer from the surface of the catalyst back to the azobenzene molecule. [3, 5]

To the best of our knowledge, catalysis of the thermal Z-E isomerization of azobenzene is described in the literature only with the use of Au nanoparticles in a form of spheres. Thus in our research, we have focused on the investigation of the influence of gold nanorods, the most popular anisotropic nanostructures, on the same reaction monitored for a model azobenzene molecule.

LITERATURA

- [1] Nitzan A, Brus L (1981) Theoretical model for enhanced photochemistry on rough surfaces. *J. Chem. Phys.* 75: 2205–2214
- [2] Tarnowicz-Staniak N, Vázquez-Díaz S, Pavlov V, Matczyszyn K, Grzelczak M (2020) Cellulose as an Inert Scaffold in Plasmon-Assisted Photoregeneration of Cofactor Molecules. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 12, 17: 19377–19383
- [3] Hallett-Tapley G, D'Alfonso C, Pacioni N, McTiernan C, González-Béjar M, Lanzalunga O, Alarcona E, Scaiano J (2013) Gold nanoparticle catalysis of the *cis-trans* isomerization of azobenzene. *Chem. Commun.* 49: 10073–10075
- [4] Simioncelli S, Aramendía P (2015) Mechanistic insight into the Z–E isomerization catalysis of azobenzenes mediated by bare and core–shell gold nanoparticles. *Catal. Sci. Technol.* 5: 2110–2116
- [5] Titov E, Lysyakova L, Lomadze N, Kabashin A, Saalfrank P, Santer S (2015), Thermal *Cis-to-Trans* Isomerization of Azobenzene-Containing Molecules Enhanced by Gold Nanoparticles: An Experimental and Theoretical Study. *J. Phys. Chem. C* 119, 30: 17369–17377

Synteza oraz porównanie właściwości fluorescencyjnych pochodnych pirolo[2,3-*b*]chinoksalin.

Magdalena Zakrocka¹, Piotr Goszczycki¹

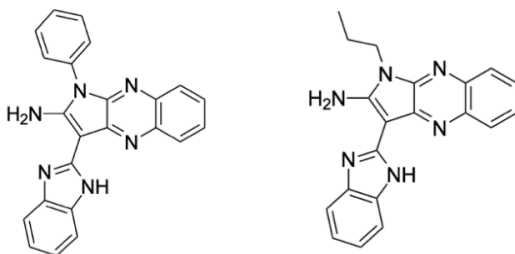
¹Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Zakład Fizykochemii Organicznej
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

magdalena.zakrocka@student.uj.edu.pl

Wraz z postępowaniem technologicznym zjawisko fluorescencji stało się jednym z kluczowych przedmiotów rozważań naukowców. Można je zaobserwować między innymi dla związków heterocyklicznych, które dzięki swojej strukturze wykazują właściwości fluorescencyjne. Przykładem takich substancji są pochodne chinoksaliny. Związki te posiadają niezliczone zastosowania począwszy od medycyny aż do przemysłu, gdzie między innymi mogą być wykorzystywane w chemosensorach fluorescencyjnych. Celem badań była synteza oraz analiza właściwości fluorescencyjnych związków, które w swojej strukturze zawierają układ pirolo[2,3-*b*]chinoksaliny, mogący stanowić przykładową grupę receptorową w chemosensorach.

W pierwszej części pracy wykonano syntezę pochodnych pirolo[2,3-*b*]chinoksaliny. Badania te, podzielono na dwie ścieżki syntetyczne, w której pierwsza z nich polegała na syntezie pochodnej pirolo-[2,3-*b*]chinoksaliny z grupą nitrylową oraz na cyklizacji z *ortho*-fenylenodiaminą, w celu uzyskania pochodnej, która będzie posiadała fragment benzimidazolu. W wyniku tej drogi udało się zsyntezować 2-amino-3-cyjano-1-fenylopirolo[2,3-*b*]chinoksalinę oraz 2-amino-3-cyjano-1-propylopirolo[2,3-*b*]chinoksalinę. W drugiej ścieżce przeprowadzono syntezę dichlorochinoksaliny z nityrem zawierającym układ benzimidazolu, a następnie wykonano cyklizację utworzonego produktu, w wyniku czego otrzymano Związek **C** oraz Związek **D** (Rys. 1).

Wszystkie otrzymane produkty scharakteryzowano przy pomocy spektroskopii IR oraz spektroskopii NMR. W następnej części pracy porównano właściwości fluorescencyjne wszystkich otrzymanych produktów poprzez pomiary wydajności kwantowej.



Rys. 1. Związek **C**: 2-amino-3-(benzimidazo-2-yl)-1-fenylopirolo[2,3-*b*]chinoksalina,
Związek **D**: 2-amino-3-(benzimidazo-2-yl)-1-propylopirolo[2,3-*b*]chinoksalina.

Efektywne receptory soli oparte na szkielecie kwasu 2,2-bis(amionometylo)propionowego: synteza i właściwości kompleksotwórcze

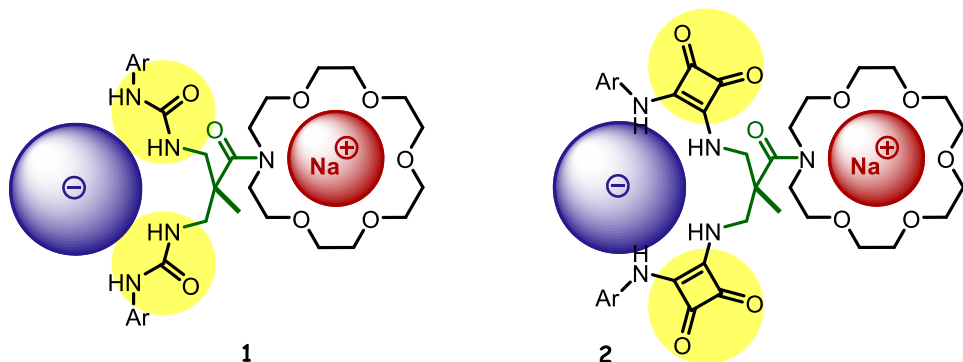
Dominika Załubiniak¹, Piotr Piątek¹

¹Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Pracownia Stereokontrolowanej Syntezy Organicznej
Ul. Ludwika Pasteura 1, 02-093 Warszawa

dzałubiniak@chem.uw.edu.pl

Receptory mające zdolność do jednoczesnego wiązania kationów i anionów (soli) mogą znacząco zwiększyć siłę wiązania poszczególnych jonów. Skompleksowanie jonu (kationu bądź anionu) może wpływać na wzrost siły wiązania przeciwnonu na skutek zmian konformacyjnych w strukturze receptora bądź oddziaływań elektrostatycznych pomiędzy różnie naładowanymi jonami. Efekt ten można osiągnąć tylko wtedy, gdy domeny wiążące poszczególne jony znajdują się blisko siebie w przestrzeni. Kluczową rolę odgrywa dobór części łączącej obie domeny wiążące (platforma molekularna). W związku z tym projektowanie oraz synteza efektywnych receptorów soli jest dużym wyzwaniem dla badaczy.

Celem naszych badań było znalezienie odpowiedniej platformy molekularnej umożliwiającej wprowadzenie trzech domen wiążących w równej odległości od siebie oraz zapewnienie odpowiedniej konformacji receptora w stanie wolnym. Zastosowanie kwasu 2,2-bis(amionometylo)propionowego pozwoliło na otrzymanie receptorów **1** i **2** zdolnych do kompleksowania soli.



Rys. 1. Receptory soli

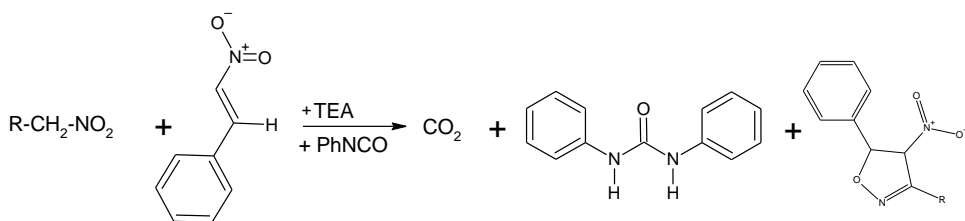
N-tlenek acetonitrylu w reakcjach ze sprzężonymi nitroalkenami

Karolina Zawadzińska¹

¹Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej,
Katedra Chemii i Technologii Organicznej C-2,
ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

karolina.zawadzinska@doktorant.pk.edu.pl

Po raz pierwszy mechanizm 1,3-dipolarnej cykloaddycji został zaprezentowany w 1960 roku przez Huisgena. Reakcja ta pozwala na łatwą, jednoetapową syntezę pięcioczłonowych związków heterocyklicznych, dlatego jej mechanizm i stereo-, regiochemia zostały dotychczas bardzo dobrze opracowane [1]. Cykloaddycja N-tlenków nitryli ze sprzężonymi nitroolefinami prowadzi do otrzymania izoksazolin, stanowiących grupę związków o dużej aktywności biologicznej [2]. N-tlenki nitryli ze względu na łatwość syntezy z wielu prekursorów tj. nitroalkany, aldoksyminy czy chloroalkoksyminy, są bardzo często wykorzystywane do otrzymywania pierścieni izoksazolinowych [1-2]. Jedną z metod syntezy tlenków nitryli jest reakcja Mukaiyama'y. Jest to reakcja izocyjanianów z nitroalkanami np. nitroetanem, 1-nitropropanem, w obecności trietyloaminy jako katalizatora reakcji. Otrzymanie tlenku nitrylu w toku tej metody potwierdzono identyfikacją pierścienia izoksazolinowego, jako finalnego produktu reakcji cykloaddycji [3,4].



Rys. 1. Reakcja syntezy izoksazolin w toku cykloaddycji β -nitrostyrenu do generowanego in situ N-tlenku nitrylu otrzymywanego metodą Mukaiyama'y.

LITERATURA

- [1] Kumar K.A., Govindaraju M., Renuka N., Kumar G.V. (2015) *J. Chem. Pharm. Res.* 7(3), 250-257.
- [2] Namboothiri I. N., Rastogi N., Ganguly B., Mobin S.M., Cojocar M. (2004) *Tetrahedron*, 60(7), 1453-1462.
- [3] Clapp L. B. (1976) *Adv. Heterocycl. Chem.*, 65-116.
- [4] Mukaiyama T., Hoshino T. (1960) *J. Am. Chem. Soc.*, 82(20), 5339-5342.

Porównanie zawartości polifenoli łącznie i kwasu mlekowego w sfermentowanym soku warzyw kapustnych

Patryk Zdziobek¹

¹*Akademia Górniczo-Hutnicza, Wydział Energetyki i Paliw, Katedra Technologii Paliw
al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków*

zdziobek@agh.edu.pl

Żywność przechowywana w poprawny sposób od wieków wpływa pozytywnie na zdrowie i życie każdego człowieka. Produkty spożywcze trzymane w odpowiednich warunkach i przy zastosowaniu naturalnych metod konserwacji pozwala zapobiegać zatruciom pokarmowym i chorobami układu pokarmowego spowodowanymi spożyciem zepsutej żywności. Wśród metod konserwacji można wyróżnić suszenie, przechowywanie w soli, wędzenie, liofilizację, pasteryzację i kiszenie [1,2]. W krajach europejskich najczęściej można napotkać kiszone warzywa. Kiszonki zawierają głównie kwas mlekowy i kwas octowy. Głównie spotykanymi w handlu kiszonkami w Stanach Zjednoczonych i Europie są ogórki kiszone, oliwki i kapusta kiszona. W Azji dostępne są różne fermentowane produkty warzywne, w tym kiszona kapusta pekińska, zwłaszcza kimchi w Korei Południowej. Proces fermentacji warzyw może skutkować pożywną żywnością, która może być przechowywana przez dłuższy czas, rok lub dłużej, bez chłodzenia. Przed fermentacją świeże owoce i warzywa zawierają różne mikroorganizmy, w tym tlenowe bakterie gnilne, takie jak *Pseudomonas*, *Erwinia* i *Enterobacter*, a także drożdże i pleśnie. Obecność chlorku sodu w trakcie fermentacji powoduje wytwarzanie przez bakterie kwasu mlekowego (LAB) kwasów organicznych i różnych związków przeciwdrobnoustrojowych [3]. Wśród głównie występujących polifenoli w kiszonych sokach warzywnych można wyróżnić kwasy fenolowe i flawonoidy [4]. Postanowiono porównać zawartości polifenoli i kwasu mlekowego w fermentowanych warzywach kapustnych. Proces fermentacji kalafiora, brokułów i kapusty białej prowadzony był przez 8 dni z użyciem liofilizowanych kultur starterowych (*Lactobacillus plantarum*, *Lactococcus lactis*) do kiszenia warzyw. Kończąc proces fermentacji dokonano spektrofotometrycznego pomiaru zawartości polifenoli łącznie z użyciem odczynnika Folina-Ciocalteu'a i wyrażono w równoważnikach kwasu galusowego. Zawartość kwasu mlekowego oznaczano również spektrofotometrycznie z wykorzystaniem 0,2% FeCl₃ jako odczynnika kompleksującego.

LITERATURA

- [1] SHEPHARD, Sue. Pickled, potted, and canned: how the art and science of food preserving changed the world. Simon and Schuster, 2006
- [2] Nummer, B. A. (2002). Historical origins of food preservation. National Center for Home Food Preservation. University of Illinois Extension.
- [3] Breidt, F., McFeeters, R. F., Perez-Diaz, I., & Lee, C. H. (2012). Fermented vegetables. Food microbiology: fundamentals and frontiers, 841-855
- [4] Platosz, N., Sawicki, T., & Wiczkowski, W., (2020) Profile of phenolic acids and flavonoids of red beet and its fermentation products. Does long-term consumption of fermented beetroot juice affect phenolics profile in human blood plasma and urine?. Polish Journal of Food and Nutrition Sciences, 70(1).

Wpływ sposobu podstawienia liganda pirenowego na właściwości tworzonych przez niego związków koordynacyjnych osmu

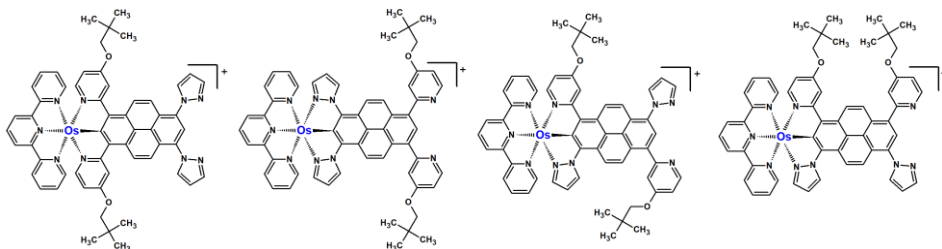
Dawid Zych¹

¹Wrocławska Wyższa Szkoła Informatyki Stosowanej "Horyzont"
ul. ks. Marcina Lutra 4 54-239 Wrocław

dawidzych92@gmail.com

Badania w zakresie związków koordynacyjnych metali bloku d wynikają z dużego zapotrzebowania na materiały dedykowane nowym technologiom takim jak diody elektroluminescencyjne, ogniwa słoneczne itd. W ciągu ostatniej dekady zaprezentowano układy zawierające w swojej strukturze ligandy mostkujące będące pochodnymi benzenu, pirazyny, pirenu. W przypadku związków koordynacyjnych typu [(NNN)M(NCN-piren-NCN)M(NNN)]ⁿ oraz [(NNN)M(NCN-piren-NCN)]^m wykazano znaczące różnice we właściwościach fotofizycznych w odniesieniu do rodzaju grup heteroarylowych będących podstawnikami pirenu, jak również skoordynowanego metalu [1]. Z punktu widzenia kontynuacji badań w tym zakresie sprawdzono również możliwość syntezy 1,3,6,8-tetrapodstawionych ligandów pirenów zawierających dwa rodzaje podstawników w jednej cząsteczce podstawionych w sposób symetryczny/niesymetryczny względem osi symetrii struktury, jak i wynikające z tych zmian właściwości fotofizyczne molekuł [2,3].

W ramach niniejszego wystąpienia omówiony zostanie wpływ podstawienia liganda mostkującego (pirenowego) na zmianę właściwości mononuklearnych związków koordynacyjnych osmu w oparciu o wyniki obliczeń kwantowo-chemicznych.



Obliczenia wykonano na komputerach Wrocławskiego Centrum Sieciowo-Superkomputerowego (<http://www.wcss.pl>), grant obliczeniowy Nr 18

LITERATURA

- [1] Zych D, Słodek A, Matuszczyk D, Golba S, (2018) Comprehensive Study of Mononuclear Osmium Complexes with Various Pyrene Ligands, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 47, 5117-5128
- [2] Zych D, Słodek A (2020) Double NCN-cyclometalating pyrene derivatives with two kinds of substituents – experimental and theoretical investigations, *Journal of Molecular Structure*, 1202, 127282
- [3] Zych D, Słodek A (2019) Pyrene derivatives with two types of substituents at positions 1-, 3-, 6-, and 8- – ad or necessity?, *RSC Advances*, 9, 24015-24024

PREZENTACJE **POPULARNONAUKOWE**



Postęp i wyzwania w badaniach nad mikro- i nanoplastikiem

Szymon Gaca¹

*¹Politechnika Poznańska, Wydział Technologii Chemicznej, Zakład Chemii Organicznej
ul. Berdychowo 4, 60-965 Poznań*

szymongaca@gmail.com

Wielkotonażowa produkcja syntetycznych polimerów połączona z nieracjonalną gospodarką odpadami polimerowymi doprowadziła do gromadzenia się ich w ekosystemach, gdzie wcześniej nie występowały. Dobrze znanym i opisanym w literaturze przykładem takiej nieracjonalnej gospodarki jest powstanie „Wielkiej Pacyficznej Plamy Śmieci” [1]. Badania nad wspomnianym obiektem dostarczyły wielu cennych informacji dotyczących degradacji polimerów.

Według wspomnianych badań stopniowy rozkład odpadów polimerowych prowadzi do powstawania cząstek wielkości rzędu mikro- i nanometrów. Taki rozmiar pozwala im w łatwy sposób przemieszczać się wraz z wiatrem czy ciekami wodnymi. Ich niewielka średnica ułatwia im przedostawanie się do wnętrza organizmów żywych [2]. Fakt ten nasuwa zasadnicze pytania: ile i jakich cząsteczek polimerowych przedostaje się do organizmów żywych oraz w jaki sposób wpływają one na ich zdrowie? Udzielenie odpowiedzi na te pytania nie jest łatwe ze względu na ich niewielki rozmiar oraz budowę chemiczną zblizoną do związków budujących organizmy żywe.

Sugerowane przez National Oceanic and Atmospheric Administration techniki analityczne bazują na mikroskopii optycznej oraz spektrofotometrii w podczerwieni [3]. Publikacja porównująca rezultaty analiz bazujących na powyższych zaleceniach wykazała, że otrzymane wyniki znacząco się różnią [4].

Powyższe przykłady potwierdzają, że temat mikro- i nanoplastiku wciąż wymaga wielu badań. W moim wystąpieniu postaram się zachęcić do prowadzenia prac badawczych w tym zakresie.

Serdeczne podziękowania kieruje do dr Eugeni Nuñez Calzado, która zainteresowała mnie powyższym tematem.

[1] Jambeck JR, Geyer R, Wilcox C, Siegler TR, Perryman M, Andrady A, Narayan R, Law KL (2015) Marine pollution. Plastic waste inputs from land into the ocean. *Science* 347 (6223): 768-71

[2] Lehner R, Weder C, Petri-Fink A, Rothen-Rutishauser B (2019) Emergence of Nanoplastic in the Environment and Possible Impact on Human Health. *Environ Sci Technol.* 19;53(4):1748-1765.

[3] Masura J, Baker J, Foster G, Arthur C (2015) Laboratory Methods for the Analysis of Microplastics in the Marine Environment: Recommendations for quantifying synthetic particles in waters and sediments. Technical Memorandum NOS-OR&R-48

[4] Isobe A, Buenaventura NT, Chastain S, Chavanich S, Cózar A, DeLorenzo M, Hagmann P, Hinata H, Kozlovskii N, Lusher AL, Martí E, Michida Y, Mu J, Ohno M, Potter G, Ross PS, Sagawa N, Shim WJ, Song YK, Takada H, Tokai T, Torii T, Uchida K, Vassillenکو K, Viyakarn V, Zhang W, (2019) An interlaboratory comparison exercise for the determination of microplastics in standard sample bottles *Marine Pollution Bulletin* 146: 831-837

Związki organiczne oparte na układach heterocyklicznych sześcioczłonowych mające właściwości neuroleptyczne, nasenne i uspokajające

Lukasz Grabowski¹

¹Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Filozofii i Nauk Społecznych, Instytut Psychologii, Katedra Psychologii Klinicznej i Neuropsychologii, ul. Fosa Staromiejska 1a, 87-100 Toruń; Forum Badań Zaburzeń Czynnościowych, www.zaburzeniafunkcjonalne.com

890403@protonmail.ch

Celem prezentacji jest przedstawienie wybranych związków o działaniu neuroleptycznym (przeciwpsychotycznym), nasennym oraz uspokajającym, których budowa chemiczna oparta jest o połączenia pierścieniowe z sześcioma członami, gdzie jeden lub kilka atomów jest innych niż węgiel. Jedną z najważniejszych grup o działaniu neuroleptycznym i uspokajającym są pochodne fenotiazyny. Charakteryzują się podstawową strukturą trójpierścieniową, gdzie zlokalizowany w pozycji 9 atom siarki określa ich optymalne działanie przeciwpsychotyczne. Można zmieniać właściwości fenotiazyn poprzez wydłużanie lub rozgałęzianie łańcucha węglowego, który jest połączony z podstawową strukturą przez azot. Ze względu na to wyróżniamy następujące typy tych leków: alifatyczny, piperydyny oraz piperazyny. Chemicznie podobne do grupy fenotiazynowej są azafenotiazyny, będące środkami przeciwcukrzycowymi. Nie są jednak szczególnie efektywne w terapii chorób psychicznych. Podstawowymi wskazaniami do stosowania fenotiazyn są: psychozy schizofreniczne, epizody maniakalne i psychozy egzogenne. Następną rodziną związków chemicznych o istotnych właściwościach psychofarmakoterapeutycznych są pochodne układu 1H-1,4-benzodiazepiny. Jednymi z najważniejszych substancji są tutaj diazepam (*Relanium*) i chlorodiazepoksyd (*Elenium*). Niektóre pochodne benzodiazepiny są specyficznie przeznaczone do leczenia problemów ze snem, na przykład bezsenności. Można wymienić tutaj następujące związki: brotizolam, nitrazepam i flurazepam. Są one bezpieczniejsze i wnoszą mniejsze ryzyko uzależnienia od poprzednio stosowanych barbituranów. Mimo tego, do leczenia bezsenności nie są stosowane wyłącznie benzodiazepiny. Wśród innych leków nasennych wymienić można: zolpidem, zopiklon i klometiazol. Problemy ze snem mogą pojawiać się zarówno w zostrzonych stanach psychicznych, jak i depresyjnych. Prawidłowy sen jest warunkiem niezbędnym do regeneracji organizmu chorego, przeto należy go wyregulować, aby pacjent był w stanie reagować zadowolająco na różne formy psychoterapeutyczne.

LITERATURA

[1] Grabowski Ł (w druku) Syntetyczne leki organiczne zawierające układy heterocykliczne wpływające na czynność układu nerwowego ośrodkowego i obwodowego. Wydawnictwo Naukowe Tygiel – artykuł do monografii.

Składniki aktywne w kosmetologii

Monika Hryniewicz¹

¹*Politechnika Wroclawska, Wydział Chemiczny, Norwida 4/6, 50-373 Wrocław*

monika.hryniewicz13@gmail.com

Składniki aktywne wzbogacają właściwości kosmetyków oraz wpływają na ich działanie. Mogą się one znajdować zarówno w kosmetykach pielęgnacyjnych jak i produktach do makijażu. Stan naszej skóry zależy od tego co na nią nakładamy, w jakiej ilości i jak ją pielęgnujemy. Na rynku jest wiele składników aktywnych w różnych stężeniach. Warto wiedzieć jakie jest ich działanie i w jakiej ilości nakładać by nie uszkodzić komórek skóry.

Budowa skóry składa się z czterech warstw: rogowej, ziarnistej, kolczystej i podstawowej. Każda pełni swoje określone funkcje i jeśli zadbamy odpowiednio o każdą z nich będą mogły dłużej oraz lepiej je pełnić. Wielkość cząsteczek ma wpływ na wchłanianie kosmetyku np. kwas hialuronowy, którego z wiekiem mamy coraz mniej oraz odpowiada za jędrność i elastyczność skóry, wnika w jej głąb aż do warstwy właściwej, za to kwas salicylowy przenika tylko przez warstwę sebum, wnika w pory skórne oraz mieszki włosowe[1][2]. Każdy składnik aktywny zawdzięcza swoje działania budowie chemicznej.

Na rynku kosmetycznym jest coraz więcej produktów z tzw. dobrym składem, dzięki którym możemy uzyskać lepsze efekty. Przez poszerzenie swojej wiedzy w temacie pielęgnacji możemy lepiej zadbać o naszą cerę, a tym samym poprawić jej kondycję i wygląd. Coraz częściej w sklepach pojawiają się produkty, które wcześniej były stosowane tylko w gabinetach kosmetycznych, a dzisiaj są udostępnione do użytku w warunkach domowych.

- Kwasy AHA
- Kwasy BHA
- Kwasy PHA
- Kwas TCA
- Kwas azelainowy
- Kwas hialuronowy
- Witamina C
- Witamina B
- Witamina A
- Trehaloza

Rys. 1. Wybrane składniki aktywne w kosmetologii

LITERATURA

[1] Transport przeznaskórkowy aktywnych składników kosmetyków, Magdalena Malinowska, Elżbieta Sikora, Jan Ogonowski

[2] Kosmetyka stosowana, Joanna Dylewska-Grzelakowska

Kompatybilność rop naftowych – a komu to potrzebne?

Przemysław Jarosiński¹

¹*Politechnika Warszawska, Wydział Budownictwa, Mechaniki i Petrochemii, Instytut Chemii,
Zakład Chemii i Technologii Organicznej
ul. Łukasiewicza 17, 09-400 Plock*

przemyslaw.jarosinski@pw.edu.pl

Ropa naftowa od wielu lat jest niezwykle istotnym surowcem dla światowej gospodarki. Nieustanny wzrost liczby ludności i dążenie do podnoszenia standardów życia w krajach rozwijających się skutkuje ciągłym wzrostem jej zużycia. Niesłabnący popyt na ropę każe zastanowić się nad kwestią jej podaży, ponieważ zasoby ropy nie są nieskończone. Ciągłe odkrywane są nowe złoża, ale są one coraz trudniejsze do eksploatacji, a znajdowane gatunki ropy to coraz częściej ropy ciężkie, sprawiające problemy przy transporcie i przerobie. Sposobem na rozwiązanie tych problemów jest mieszanie różnych rop, jednak nie jest to proste zadanie. Różnorodność i złożoność składu rop sprawia, że niewłaściwe wymieszanie różnych gatunków może spowodować destabilizację dyspersji ich najcięższych składników – asfaltenów – co w konsekwencji skutkuje wytrącaniem uciążliwych osadów, które zatykają rurociągi i aparaturę, generując straty finansowe.

W prezentowanym referacie pokrótce opisano kwestie pochodzenia ropy naftowej, jej złóż (w tym niekonwencjonalnych), różnorodności gatunków i złożoności składu. Omówiono stabilność fazową ropy i różne czynniki na nią wpływające, zwracając szczególną uwagę na mieszanie różnych gatunków ropy. Przybliżono temat kompatybilności (rozumianej jako kinetyczna stabilność dyspersji mieszaniny) rop, metod jej badania oraz sposobów poprawy.

Serdecznie dziękuję Organizatorom Sympozjum za wydłużenie terminu przesyłania abstraktów.

LITERATURA

- [1] Kajdas Cz (1979) Chemia i fizykochemia ropy naftowej. Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa
- [2] Hunt JM (1979) Petroleum geochemistry and geology. W.H. Freeman and Co, San Francisco
- [3] Grzywa E, Molenda J (2000) Technologia podstawowych syntez organicznych. Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa
- [4] Speight JG (2006) The Chemistry and Technology of Petroleum Fourth Edition. Taylor and Francis Group, Boca Raton
- [5] Ptak S, Jakóbiec J (2016) Ropa naftowa jako główny surowiec energetyczno-przemysłowy. Nafta-Gaz 6/2016: 451-460
- [6] BP Statistical Review of World Energy 2021 | 70th edition, <https://www.bp.com/en/global/corporate/energy-economics/statistical-review-of-world-energy.html> , dostęp 12.09.2021
- [7] Wiehe IA, Kennedy RJ (2000) The Oil Compatibility Model and Crude Oil Incompatibility. Energy Fuels 14: 56-59
- [8] Jarosiński P, Lorek A (2018) Asfalteny naftowe – przegląd wybranych zagadnień. Nafta-Gaz 9/2018: 690-697
- [9] Maqbool T, Srikiatwong P, Fogler HS (2011) Effect of Temperature on the Precipitation Kinetics of Asphaltenes. Energy Fuels 25(2): 694-700
- [10] Rodríguez S, Ancheyta J, Guzmán R, Trejo F (2016) Experimental Setups for Studying the Compatibility of Crude Oil Blends under Dynamic Conditions. Energy Fuels 30(10): 8216-8225

Kombucha pod lupą

Anna Kaczmarek¹

*¹Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii
ul. Fryderyka Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław*

315124@uwr.edu.pl

Kombucha to napój, który powstaje w wyniku fermentacji słodzonej herbaty. Aby fermentacja mogła zajść należy dodać do wywaru tzn. „grzyb herbaciany”, będący symbiotyczną kulturą bakterii i drożdży, w skrócie zwaną SCOBY.

Pierwsze doniesienia dotyczące wykorzystania tego trunku pochodzą z Mandżurii i są datowane na około dwustu lat przed naszą erą [1]. Kilka wieków później napój dotarł także do Europy, gdzie jego popularność utrzymywała się do momentu powstania słodzonych napojów gazowanych. Obecnie można zauważyć powracający trend picia kombuchy, wiążący się z doniesieniami o jej leczniczym działaniu. Trunek zawdzięcza swoją popularność właściwościom przeciwutleniającym oraz przeciwdrobnoustrojowym. Dodatkowo stwierdzono, że przyczynia się także do obniżenia stężenia cholesterolu, wspomaga układ immunologiczny oraz stymuluje detoksykację wątroby [2]. Prozdrowotne działanie napoju przypisuje się obecności szeregu różnych związków chemicznych, takich jak polifenole, kwasy organiczne, aminokwasy czy witaminy rozpuszczalne w wodzie. Istotną jest także obecność mikroorganizmów probiotycznych [3].

Celem referatu jest przeanalizowanie fermentacji związanych z kombuchą, jej składu chemicznego oraz wpływu na zdrowie.

LITERATURA

- [1] Jayabalan R, Malbasa R, Sathishkumar M (2016) Kombucha. Reference module in food science
- [2] Jakubczyk KP, Piotrowska G, Janda K (2020) Characteristics and biochemical composition of kombucha – fermented tea. *Med Og Nauk Zdr* 26(2): 94–96
- [3] Fu C, Yan F, Cao Z, Xie F, Lin J (2014) Antioxidant activities of kombucha prepared from three different substrates and changes in content of probiotics during storage. *Food Sci Technol* 34 (1): 123–126

Występowanie środków ochrony roślin i ich metabolitów w środowisku wodnym

Aneta Kohnke¹, Ewa Siedlecka¹, Aleksandra Bielicka- Gieldoń¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63
Katedra Chemii Ogólnej i Nieorganicznej

kohnkeaneta@gmail.com

Stopień zagrożeń związanych z zanieczyszczeniem pestycydami oraz ich pochodnymi uwzględniono w rozporządzeniu Ministra Zdrowia z dnia 7 grudnia 2017r. Pestycydy określono, jako środki ochrony roślin i produkty biobójcze. Stężenie poszczególnych substancji w wodach podziemnych nie powinno przekraczać $0,1 \mu\text{g}/\text{dm}^3$, a sumaryczna zawartość wszystkich wykrytych i oznaczonych pestycydów (razem z istotnymi metabolitami, produktami rozpadu i reakcji) nie może przekraczać $0,5 \mu\text{g}/\text{dm}^3$ [1].

Stosowanie środków ochrony roślin w produkcji roślinnej przynosi producentom duże korzyści oraz zapewnia poprawę jakości produkowanych artykułów rolno-spożywczych. Należy jednak zdawać sobie sprawę, że rosnące zużycie środków ochrony roślin w rolnictwie pociąga za sobą niebezpieczeństwo występowania ich pozostałości w wodach powierzchniowych, co w konsekwencji może stanowić zagrożenie nie tylko dla środowiska naturalnego, ale także dla konsumenta. Dlatego tak ważnym aspektem jest odpowiednie usuwanie, ale jak i wykrywanie tych pestycydów [2].

Ważnym miejscem są wody Wisły, Warty a także Odry, ponieważ transportują one nie tylko ogromne ilości materiału terygenicznego pochodzącego z denudacji obszaru zalewni, ale także olbrzymie ładunki zanieczyszczeń. Rzeki te i ich dopływy są odbiornikiem olbrzymich ilości ścieków przemysłowych i komunalnych. Warunki te mogą doprowadzić do poważnych zanieczyszczeń wód powierzchniowych i gruntowych [3].

W pracy przedstawiono poszczególne miejsca na terenie całej Polski, gdzie zostały znalezione pestycydy w znaczącej ilości. Uzbieranie takich wyników może posłużyć w przyszłej epidemiologii i badaniach środowiska. Dodatkowo może pomóc wybranym placówkom do wdrożenia analiz nowych pestycydów

LITERATURA

- [1] K. Dragon, D. Drozdziński, J. Gorski, R. Kruc, „The migration of pesticide residues in groundwater at a bank filtration site (Krajkowo well field, Poland)”, *Environ Earth Sci* **78**, 593 (2019).
- [2] G.Pazikowska-Sapota , K. Galer-Tatarowicz , G. Dembska , M. Wojtkiewicz , E. Duljas, S. Pietrzak, L. Dzierzbicka-Glowacka, „The impact of pesticides used at the agricultural land of the Puck commune on the environment of the Puck Bay”, Published March 19, 2020, PubMed
- [3] D. Potrykus, A. Szymkiewicz, M. Pruszkowska-Caceres, B. Jaworska-Szulc, A. Gumuła-Kawęcka, „Skład chemiczny wód podziemnych dopływających z Pobrzeża Kaszubskiego do Zatoki Puckiej”, *Przegląd Geologiczny*, vol. 68, nr 9, 2020

Izoksazolidyny i izoksazoliny

– charakterystyka, znaczenie biologiczne i metody syntezy

Mikołaj Sadowski¹, Karolina Kula¹

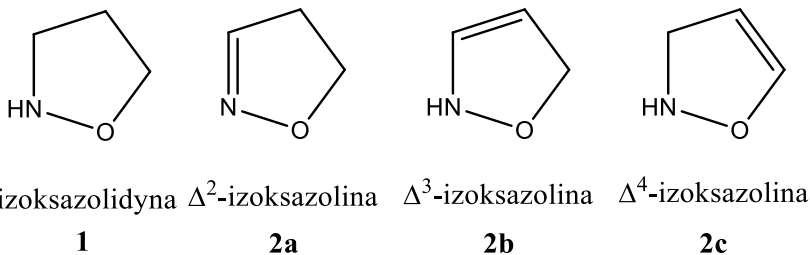
¹Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, C2- Katedra Chemii Organicznej
ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

mikolaj.sadowski@student.pk.edu.pl

Izoksazolidyna (**1**) (tetrahydroizoksazol) i izoksazoliny (**2a-c**) (dihydroizoksazole) są uwodornionymi pochodnymi izoksazolu, będącego nienasyconym pięciocłonowym związkiem heterocyklicznym posiadającym dwa sąsiadujące heteroatomy: azot oraz tlen[1].

Pochodne izoksazolidyny znalazły zastosowanie w przemyśle, między innymi jako inhibitory korozji, stabilizatory w przetwórstwie tworzyw sztucznych, herbicydy oraz w medycynie, jako antybiotyki[2-4]. Pochodne izoksazolin stosowane są jako insektycydy w weterynarii i rolnictwie[5].

Powszechną i jednocześnie ekologiczną metodą otrzymywania tych związków, ze względu na łatwość jej zastosowania, oraz pełną ekonomię atomową, jest synteza z wykorzystaniem reakcji [3+2] cykloaddycji. W przypadku izoksazolidyn addycja zachodzi pomiędzy nitronem a olefiną. Przy syntezie izoksazolin w miejsce nitronu stosuje się tlenki nitryli[1].



Rys. 1. Wzory strukturalne di- i tetra- hydroizoksazoli.

LITERATURA

- [1] Grunanger P, Vita-Finzi P, (1991) Isoxazoles. wiley, ISBN: 0-471-02233-0
- [2] Ali SA, Saeed MT, Rahman SU (2003) The isoxazolidines: A new class of corrosion inhibitors of mild steel in acidic medium. Corrosion Science. 45(2): 253–266
- [3] Prabhu Vaikunth S, (1997) Addition polymer composition containing isoxazolidine compounds, European Patent Office EP 0767203A1
- [4] Taketomi I, Yamamura H (1988) Herbicide for wheat field, Japanese Patent Office JPS647A
- [5] Gonçalves IL, et al (2021) Discovery, development, chemical diversity and design of isoxazoline-based insecticides. Bioorg Med Chem 30: 115934

Zolgensma® - jak działa najdroższy lek świata?

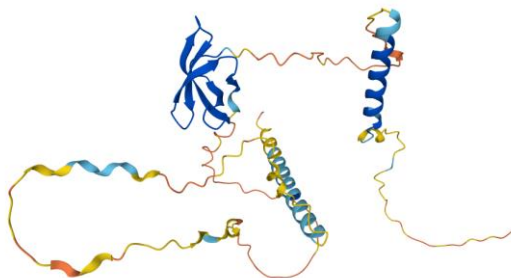
Klaudia Szczerba¹

¹Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. Fryderyka Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

299818@uwr.edu.pl

Onasemnogen abeparwovek stanowi lek opracowany w celu terapii genowej DNA rdzeniowego zaniku mięśni (*ang. SMA – Spinal muscular atrophy*). Jest to najczęstsza choroba genetyczna dotycząca niemowlęta oraz skutkująca upośledzeniem neuronów ruchowych, zanikiem mięśni szkieletowych i przedwczesną śmiercią [1]. U jej podłoża leży obniżony poziom białka SMN, którego stężenie w motoneuronach, pod wpływem działania Zolgensma, ulega podwyższeniu. Dostarczanie białka do komórek uzyskuje się poprzez wykorzystanie adenowirusów serotypu 9 z syntetyczną sekwencją DNA genu *SMN1* [2,3]. Do uzyskania trwałego efektu leczenia wystarczy jedynie jedna dawka biofarmaceutyku, natomiast jej cena detaliczna wynosi aż 2.125 miliona dolarów amerykańskich [4].

W swoim wystąpieniu autorka przybliży zarys choroby rdzeniowego zaniku mięśni, przedstawi mechanizm działania leku na to zaburzenie oraz przyczyny kontrowersyjnej ceny omawianej terapii genowej.



Rys. 1. Przewidywany model ludzkiego białka SMN.

LITERATURA

- [1] Menduti G, Rasa D (2020) Drug Screening and Drug Repositioning as Promising Therapeutic Approaches for Spinal Muscular Atrophy Treatment. *Frontiers in Pharmacology* 11: 1-37
- [2] Stevens D, Claborn M (2020) Onasemnogene Apearwovec-xioi: Gene Therapy for Spinal Muscular Atrophy. *The Annals of Pharmacotherapy* 54: 1001-1009
- [3] Dean R, Jensen I (2021) An updated cost-utility model for onasemnogene abeparwovec (Zolgensma®) in spinal muscular atrophy type 1 patients and comparison with evaluation by the Institute for Clinical and Effectiveness Review (ICER). *Journal of Market Access & Health Policy* 9: 1-12
- [4] Broekhoff T, Sweegers C (2021) Early Cost-Effectiveness of Onasemnogene Apearwovec-xioi (Zolgensma) and Nusinersen (Spinraza) Treatment for Spinal Muscular Atrophy I in The Netherlands With Relapse Scenarios. *Value in Health* 24: 759-769

Wpływ modyfikacji plazmowej na właściwości elektroprzędzonych nanowłókien polimerowych

Angelika Winkler¹

¹*Politechnika Wroclawska, Wydział Elektryczny, Katedra Podstaw Elektrotechniki i Elektrotechnologii
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

angelika.winkler@pwr.edu.pl

Proces elektroprzędzenia włókien, ze względu na łatwość implementacji, niski koszt i możliwość kontrolowania rozmiaru włókien, jest najpopularniejszą z metod wytwarzania nanowłókien i stosowany jest również na skalę przemysłową. Wytwarzane nanowłókniny charakteryzują się unikalnymi właściwościami, np. dużą powierzchnią właściwą, wysoką porowatością oraz małym rozmiarem porów. Z drugiej strony nie są one pozbawione wad. W zależności od zastosowanego do produkcji polimeru obserwowane są problemy m.in. z niedostateczną wytrzymałością mechaniczną, słabą bioaktywnością i niską biokompatybilnością, co skutecznie ogranicza wykorzystanie nanowłókien w praktyce.

Wśród technik modyfikacji powierzchni mat włóknistych opisanych w literaturze [1] rosnącym zainteresowaniem cieszy się obecnie modyfikacja plazmą nietermiczną. Wyniki zrealizowanych badań potwierdzają, że ten sposób obróbki powierzchni może pozytywnie wpłynąć na właściwości mechaniczne, biologiczne i chemiczne nanowłókien. Przeprowadzone dotychczas badania ukierunkowane były przede wszystkim na identyfikację wpływu plazmy nietermicznej na biokompatybilność włókien (np. poprzez zwiększenie hydrofilowości), sieciowanie ich powierzchni oraz immobilizację/adsorpcję wybranych cząsteczek (np. białek lub enzymów) [2-5]. Należy mieć na uwadze, że modyfikacja plazmowa może wywoływać również negatywne skutki. Przede wszystkim może mieć miejsce nieodwracalne trawienie powierzchni włókien. Z tego powodu szczególnie istotnym zagadnieniem jest optymalizacja parametrów obróbki plazmowej.

Pomimo to odpowiednia modyfikacja nanowłókien polimerowych zimną plazmą może skutecznie rozszerzyć ich wykorzystanie w zastosowaniach biomedycznych, biologicznych czy spożywczych. Przyszłe prace badawcze mogłyby dotyczyć porównania bądź połączenia tego rodzaju obróbki z innymi metodami modyfikacji powierzchni.

LITERATURA

- [1] Ramakrishna S, Fujihara K, Teo WE, Lim TC, Ma Z (2005) Functionalization of Polymer Nanofibers. In *An Introduction to Electrospinning and Nanofibers* 247–274
- [2] Alemi PS, Atyabi SA, Sharifi F, Mohamadali M, Irani S, Bakhshi H, Atyabi SM (2019) Synergistic effect of pressure cold atmospheric plasma and carboxymethyl chitosan to mesenchymal stem cell differentiation on PCL/CMC nanofibers for cartilage tissue engineering. *Polym Adv Technol* 30(6): 1356–1364
- [3] Ghorbani F, Zamanian A (2018) Oxygen-plasma treatment-induced surface engineering of biomimetic polyurethane nanofibrous scaffolds for gelatin-heparin immobilization. *e-Polym* 18(3): 275–285
- [4] Kalani MM, Nourmohammadi J, Negahdari B (2019) Osteogenic potential of rosuvastatin immobilized on silk fibroin nanofibers using argon plasma treatment. *Biomed Mater* 14(2): 025002
- [5] Meghdadi M, Atyabi SM, Pezeshki-Modaress M, Irani S, Noormohammadi Z, Zandi M (2019) Cold atmospheric plasma as a promising approach for gelatin immobilization on poly(ϵ -caprolactone) electrospun scaffolds. *Prog Biomater* 8(2): 65–75

Fluorowane polimery i ich zastosowania

Mariusz Zalewski¹

*¹Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, Katedra Technologii Chemicznej Organicznej i Petrochemii,
Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice*

Mariusz.Zalewski@polsl.pl

Fluor jest niemetalem, występującym w postaci dwuatomowej cząsteczki F_2 . Jest silnie trującym gazem, jednak ze względu na najwyższą elektroujemność spośród wszystkich pierwiastków w układzie okresowym odznacza się największą reaktywnością. Dzięki tej właściwości w łatwy sposób można wprowadzić go do cząsteczki związku organicznego, zastępując nim atomy wodoru, bez znaczącego zwiększenia jej wymiarów. Fluor zawarty jest w wielu cząsteczkach wykorzystywanych między innymi w chemii medycznej, agrochemikaliach, biologii chemicznej czy chemii materiałowej [1], [2].

Od lat 40 XX w., kiedy firma DuPont opatentowała metodę syntezy pierwszego fluoropolimeru – poli(tetrafluoroetyleny), inaczej Teflonu – fluorowane polimery stały się przedmiotem badań naukowców z całego świata, a możliwości ich zastosowania poszerzają się z każdym kolejnym rokiem. Dzięki większej wytrzymałości w stosunku do ich niefluorowanych odpowiedników, fluorowane polimery zapewniają doskonałe parametry niezbędne do pracy w trudnych warunkach w motoryzacji, przemyśle czy elektrotechnice. Polimery te otrzymane mogą być na drodze klasycznych polimeryzacji łańcuchowej lub stopniowej, jednak aby uzyskać lepsze właściwości stosuje się także ich modyfikacje pozwalające na lepszą kontrolę przebiegu reakcji. Specjalistyczne polimery tego typu mogą być użyte w wielu dziedzinach medycyny, takich jak terapia genowa, dostarczanie białek i leków do komórek oraz przy detekcji i leczeniu zmian nowotworowych.

LITERATURA

- [1]. I. Ojima, “Exploration of Fluorine Chemistry at the Multidisciplinary Interface of Chemistry and Biology,” *J. Org. Chem.*, vol. 78, no. 13, pp. 6358–6383, Jul. 2013.
- [2]. M. A. Miller and E. M. Sletten, “Perfluorocarbons in Chemical Biology,” *ChemBioChem*, vol. 21, no. 24, pp. 3451–3462, Dec. 2020.

POSTERY
BADANIA WŁASNE



Wpływ $\text{NH}_2\text{-UiO-66 (Zr)}$ osadzonych na powierzchni TiO_2 NTs na właściwości fotodegradujące zanieczyszczenia

Mateusz Adam Baluk^{1,2,3}, Adriana Zaleska-Medynska¹

¹Katedra Technologii Środowiska, Wydział Chemii Uniwersytetu Gdańskiego,
80-306 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63

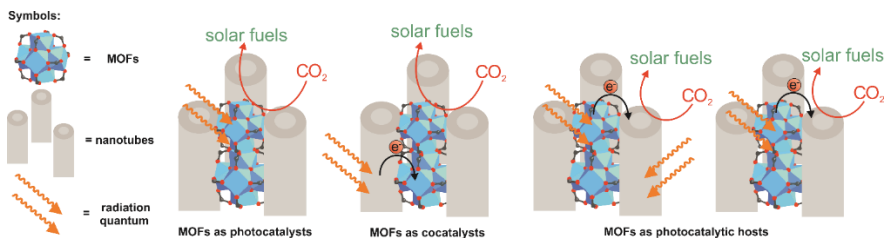
²Naukowe Koło Chemików Uniwersytetu Gdańskiego

³Bałtyckie Stowarzyszenie Chemików

mateuszadam96@gmail.com

Nanorurki tlenku tytanu(IV) to fotokatalizator półprzewodnikowy o przerwie energetycznej o wartości 3,2 eV. W związku z czym, aby go wzбудzić potrzeba wysoko kosztownego promieniowania z zakresu ultrafioletu. TiO_2 NTs charakteryzuje się dużą stabilnością chemiczną i fizyczną oraz jest bardzo tani. Aby umożliwić wzbudzenie półprzewodnika promieniowaniem z zakresu widzialnego – nanorurki TiO_2 można zmodyfikować powierzchniowo innymi fotokatalizatorami [1,2].

Przedstawione badania przedstawiają wpływ metalo-organicznych szkieletów na bazie cyrkonu i kwasu 2-aminotereftalowego (UiO-66-NH_2 (Zr)) [3] na powierzchni nanorurek ditlenku tytanu na właściwości fotokatalityczne w modelowej reakcji fotodegradacji toluenu w fazie gazowej.



Rys. 1. Rodzaj funkcji MOFs na właściwości fotokatalityczne NTs.

Badania zostały sfinansowane w ramach BMN T020 B876 21

LITERATURA

- [1] Razali Mohd Hasmizam, Mahani Yusoff, "Highly Efficient CuO Loaded TiO_2 Nanotubes Photocatalyst for CO_2 Photoconversion", *Materials Letters* 221, (2018), 168-171
- [2] Zhang Qianyi, Ying Li, Erik A. Ackerman, Marija Gajdardziska-Josifovska, Hailong Li, "Visible Light responsive Iodine-Doped TiO_2 for Photocatalytic Reduction of CO_2 to Fuels", *Applied Catalysis A. General*, 400 (2011), 195-202
- [3] Xiao Juan Ding, Qichao Shang, Yujie Xiong, Qun Zhang, Yi Luo, Shu-Hong Yu, Hai-Long Jiang, "Boosting Photocatalytic Hydrogen Production of a Metal-Organic Framework Decorated with Platinum Nanoparticles: The Platinum Location Matters", *Angewandte Chemie* 128, no. 32 (August 2016): 9535-39

Proces hydratacji PF₅ – obliczenia kwantowo–mechaniczne

D. Faron¹, P. Skurski,¹ I. Anusiewicz¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Teoretycznej
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

dawid.faron@phdstud.ug.edu.pl

Nieodłącznym zanieczyszczeniem, wielu organicznych rozpuszczalników są śladowe ilości wody, które oddziałując z substancją rozpuszczaną, negatywnie wpływają na właściwości fizykochemiczne całego roztworu. Dla przykładu, doniesiono, że w bateriach typu litowo-jonowych (LiBs), śladowe ilości wody oddziałując z elektrolitem LiPF₆ w reakcji $\text{LiPF}_6 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{LiF} + \text{POF}_3 + 2\text{HF}$ (1) z wydzielaniem kwasu fluorowodorowego (HF), powodują spadek wydajności baterii [1]. Dlatego przy użyciu metod obliczeniowej chemii kwantowej, zbadano proces hydratacji PF₅ dla n cząsteczek H₂O, gdzie n=1 – 3. Rozważając struktury, mogące istnieć w temperaturze pokojowej, czyli do 20 kcal/mol względem najniższej położonego izomeru. Dla jednej cząsteczki H₂O (n=1) o najniższej energii otrzymano w wyniku hydratacji, kompleks quasi-oktaedryczny z wiązaniem koordynacyjnym pomiędzy atomami tlenu i fosforu oraz o względnej niższej energii (1,44 kcal/mol – 5,80 kcal/mol) w wyniku hydrolyzy, dwa izomery, odpowiednio PF₄OH/HF połączone ze sobą wiązaniami wodorowymi oraz PF₃O/2HF, zgodnie z równaniem $\text{PF}_5 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{PF}_3\text{O} + 2\text{HF}$ będącą w analogii do reakcji (1). Dla (n=2) otrzymano układ o najniższej energii, taki sam jak dla (n=1), z drugą cząsteczką wody połączoną z kompleksem PF₅-H₂O wiązaniem wodorowym. Natomiast, kolejne izomery o względnej niższej energii (1,36 kcal/mol – 2,76 kcal/mol) przyjmują strukturę odpowiednio, PF₂(OH)=O z trzema HF oraz PF₄(OH)/(HF)(H₂O) z jedną cząsteczką HF oraz H₂O połączonych wiązaniami wodorowymi. Dla trzech cząsteczek wody (n=3) ogólne przewidywania co do izomerów pozostają bez zmian. Najniżej położony energetycznie pozostaje addukt PF₅-H₂O/2H₂O z dwiema cząsteczkami H₂O przyłączonymi wiązaniami wodorowymi. Natomiast, kolejne izomery o względnej niższej energii (2,01 kcal/mol – 2,38 kcal/mol) przyjmują odpowiednio, układ hydrolyzowanego trifluorku fosforu z dwoma dimerami 2(HF)₂ oraz fosforanu typu PF₃(OH)₂/(HF)₂H₂O. Ponadto przyłączenie trzeciej cząsteczki wody, zwiększa stabilność kompleksu zawierającego H₃O⁺.

LITERATURA

- [1] D. Aurbach (2000) Review of selected electrode–solution interactions which determine the performance of Li and Li ion batteries, *J. Power Sources* 89, 206–218.
- [2] D. Faron, P. Skurski, I. Anusiewicz (2019) PF₅ and PCl₅ interacting with water – Comparative study at the molecular level, *Polyhedron* 171, 285–298.

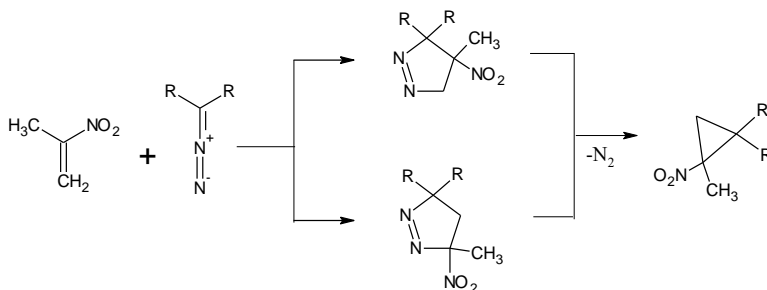
Cykloprzyłączenie 1-alkilpodstawionych analogów nitroetenu do wybranych diazozwiązków

Agnieszka Fryzlewicz¹, Radomir Jasiński¹

¹Politechnika Krakowska, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Katedra Chemii i Technologii Organicznej, ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

aga.fryzlewicz@poczta.fm

Nitroalkeny są bardzo ważnymi reagentami w chemii organicznej. Z uwagi na niedomiar elektronów są one doskonałym materiałem do wykorzystania w [3 + 2] cycloaddycji do związków nukleofilowych [1]. W tej pracy, z uwagi na szerokie spektrum zastosowań potencjalnych produktów, jako 1,3-dipole wykorzystano analogi diazometanów, które są dipolami typu allenowego. Reakcja 2-nitroprop-1-enu z diazozwiązkami może prowadzić do pięcioczłonowych związków heterocyklicznych zwanych pirazolinami lub do analogów cyklopropanu. Pirazoliny mają potencjalne zastosowanie w leczeniu nowotworów, depresji, chorób zakaźnych, wykazują również właściwości przeciwbakteryjne, przeciwgrzybicze i przeciwbólowe [2]. Z kolei analogi cyklopropanu, po wyeliminowaniu grupy nitrowej, mogą być stosowane jako inhibitory dojrzewania owoców i warzyw, co może mieć istotny wpływ na ograniczenie niszczenia żywności [3].



Rys. 1. Teoretycznie możliwe ścieżki reakcji nitroprop-1-enu z wybranymi diazozwiązkami.

LITERATURA

- [1] Lei J, Sun L, Huang S, Zhu C, Li P, He, J, Mackey V, Coy DH, He Q (2019) The antimicrobial peptides and their potential clinical applications. *Am J Transl Res* 11: 3919-3931
- [1] Dresler, E., Kącka-Zych, A., Kwiatkowska, M., Jasiński, R. (2018) Regioselectivity, stereoselectivity and molecular mechanism of [3+2] cycloaddition reactions between 2-methyl-1-nitroprop-1-ene and (Z)-C-aryl-N-phenylnitrones in the light of DFT computational study. *J. Mol. Model* 24: 329
- [2] Sharma, S., Kaur, S., Bansal, T., Gaba, J. (2014) Review on Synthesis of Bioactive Pyrazoline Derivatives. *Chem. Sci. Trans* 3: 861-875
- [3] Lurie, S. (2005) Application of 1-methylcyclopropane to prevent spoilage. *Stewart Postharvest Rev.* 1:1-4

Porównanie skuteczności mikroskopii fluorescencyjnej w badaniu niebieskich i popielatoczarnych włókien dżinsowych

Paulina Góra¹, Jolanta Wąs-Gubała²

¹Pracownia Chemii Sądowej, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

²Pracownia Badania Mikrośladów, Instytut Ekspertyz Sądowych w Krakowie
ul. Westerplatte 9, 31-033 Kraków

p.sobon@student.uj.edu.pl

Włókna bawełniane są jednymi z najbardziej rozpowszechnionych typów włókien w Europie i na świecie [1]. Dwie grupy barwnych włókien bawełnianych tj. niebieska i popielatoczarna cieszą się szczególnie dużą popularnością wśród klientów, gdyż wchodzi w skład wyrobów dżinsowych. Wyroby te są bardzo często przedmiotem badań kryminalistycznych, stanowiąc materiał dowodowy w licznych sprawach [2, 3]. Spośród metod wykorzystywanych do analizy wybarwionych włókien preferuje się te nieniszczące, jak techniki mikroskopii optycznej, mikrospektrofotometrię w zakresie UV-Vis (UV-Vis MSP) czy spektrometrię Ramana. Jednak w celu identyfikacji i porównania barwników włókienniczych dopuszczalne jest zastosowanie metod niszczących, głównie chromatograficznych [4,5].

Badany materiał stanowiło 50 par spodni dżinsowych o szerokiej gamie odcieni koloru niebieskiego i popielatoczarnego, wykonanych wyłącznie z bawełny lub z jej mieszanek z innymi rodzajami włókien. Wyroby te zostały zakupione na rynku konsumenckim, a ich wyboru dokonano z wykorzystaniem aktualnych danych statystycznych dotyczących sprzedaży odzieży w Polsce. W trakcie badań wykorzystano technikę mikroskopii fluorescencyjnej.

Analiza uzyskanych wyników wykazała, że skuteczność różnicowania niebieskich i popielatoczarnych włókien dżinsowych z wykorzystaniem mikroskopii fluorescencyjnej nie jest wystarczająca. Zastosowanie tej techniki pozwoliło jednak na częściową dyskryminację analizowanych włókien, zwłaszcza w przypadku włókien popielatoczarnych.

LITERATURA

- [1] N Šajin, Environmental impact of the textile and clothing industry, EPRS, European Parliament, 2019
- [2] M.C. Grieve, J. Dunlop, P. Haddock, An assessment of the value of blue, red, and black cotton fibres as target fibres in forensic science investigation, *Journal of Forensic Sciences* 33 (6) (1988) 1332–1344
- [3] T.W. Biermann, Blocks of colour IV: The evidential value of blue and red cotton fibres, *Science and Justice* 47 (2007) 68–87
- [4] P. Góra, J. Wąs-Gubała, Enzymatic extraction of dyes for differentiation of red cotton fibres by TLC coupled with VSC, *Science and Justice* (2019) doi: 10.1016/j.scijus.2019.02.007
- [5] D. Śmigiel-Kamińska, J. Pośpiech, J. Makowska, P. Stepnowski, J. Wąs-Gubała, J. Kumirska, The Identification of Polyester Fibers Dyed with Disperse Dyes for Forensic Purpose, *Molecules* (2019) 24, 613; doi:10.3390/molecules24030613

NtZIP11 – nowy transporter cynku z tytoniu i jego potencjalne wykorzystanie w fitoremediacji

Katarzyna Kozak¹, Anna Papierniak-Wyglądała¹, Danuta Maria Antosiewicz¹

¹Uniwersytet Warszawski, Wydział Biologii, Zakład Molekularnych Podstaw Homeostazy Metali u Roślin
ul. I. Miecznikowa 1, 02-096 Warszawa

katarzyna.kozak@biol.uw.edu.pl

Jednym z zagrożeń dla zdrowia ludzi jest zanieczyszczenie środowiska metalami ciężkimi, które mogą dostawać się do organizmu poprzez układ oddechowy, skórę lub wraz ze spożywanymi produktami. W procesie oczyszczania środowiska stosowanych jest wiele technologii – jedną z nich jest fitoremediacji wykorzystująca rośliny do usuwania zanieczyszczeń ze środowiska.

Znane są gatunki roślin naturalnie zdolne do akumulacji wysokich stężeń metali ciężkich. Niestety wydajność oczyszczania przy ich zastosowaniu jest ograniczona. Identyfikacja genów odpowiedzialnych za regulację pobierania i akumulacji metali w tkankach pozwoli na uzyskanie transgenicznych odmian o zwiększonym potencjale fitoremedycyjnym. Tym samym możliwe będzie zaproponowanie komórkowego modelu determinującego tolerancję roślin na wysokie stężenie metali ciężkich w środowisku.

Geny regulujące transport jonów metali w obrębie komórki kodują białka należące do kilku rodzin, w tym ZIP (Zrt/Irt-like Protein). Są one transporterami odpowiedzialnymi za przenoszenie kationów metali przez błony biologiczne. Białka ZIP największe powinowactwo wykazują względem Zn^{2+} i Fe^{2+} , niższe wobec m. in. Mn^{2+} , Cu^{2+} i Cd^{2+} . Nasze najnowsze badania wykazują, iż jednym z transporterów cynku u tytoniu (*Nicotiana tabacum* var. Xanthi) jest NtZIP11, silnie ekspymowane w liściach w obecności wysokich stężeń cynku [1.]. Sekwencja genomowa *NtZIP11* złożona jest z 1038 pz, które kodują 3 egzony. Białko NtZIP11 buduje 346 aa formujących 8 domen transbłonowych (TMD), pomiędzy III a IV TMD wykazano obecność hydrofilowej pętli odpowiedzialnej prawdopodobnie za transport metali. Analizy filogenetyczne pozwoliły wykazać podobieństwo NtZIP11 do białek ZIP z tytoniu i innych gatunków roślin. Na podstawie wyników uzyskanych w testach z zastosowaniem mutantów drożdżowych, jak i metodą ekspresji przejściowej konstruktu fuzyjnego *35S::GFP::ZIP11* wykazano, że NtZIP11 jest zlokalizowane w plazmolemmie i uczestniczy w pobieraniu cynku do komórki.

Wcześniejsze badania [2.] potwierdzają możliwość akumulacji cynku w wysokim stężeniu w liściach tytoniu. Uzyskanie transgenicznej odmiany tytoniu szlachetnego o zwiększonej ekspresji białka NtZIP11 mogłyby zwiększyć efektywność remediacji gleb zanieczyszczonych cynkiem.

Finansowanie: projekt NCN HARMONIA-6 2014/14/M/NZ/00527.

LITERATURA

- [1] Kozak K. i wsp., EEB 157 (2019) 69-78;
- [2] Siemianowski O., i wsp., PCE 36 (2013) 1093-1104.

Synteza Powierzchni Samoczyszczących- Projekt NKCh Klimatyczni

Damian Makowski¹, Mateusz A. Baluk², Agnieszka Manikowska¹, Emilia Mykowska¹, Oliwia Rulka¹, Elżbieta Adamska³

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Naukowe Koło Chemików UG, Gdańsk 80-306, Wita Stwosza 63

²Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Technologii Środowiska, Gdańsk 80-306, Wita Stwosza 63

³Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Analitycznej, Gdańsk 80-306, Wita Stwosza 63

makowskidamian123@gmial.com

Fotokataliza jest zjawiskiem, które zachodzi w wyniku absorpcji przez fotokatalizator promieniowania o energii większej, lub równej jego przerwie energetycznej. Powstają wówczas reaktywne pary elektron-dziura [1]. W zależności od rodzaju reakcji wyróżniamy: fotogenerowanie wodoru, fotokonwersję dwutlenku węgla oraz fotodegradację zanieczyszczeń. Ostatnia z reakcji znajduje zastosowanie min. w produkcji powierzchni samoczyszczących [2].

Celem projektu Naukowego Koła Chemików- Klimatyczni jest synteza powierzchni samoczyszczących, aktywnych w świetle widzialnym, z wykorzystaniem materiałów półprzewodnikowych. Głównym założeniem projektu jest korzystanie z zasad zielonej chemii.



Rys. 1. Zdjęcie przygotowanych powierzchni samoczyszczących przed wystawieniem na działanie promieniowania słonecznego.

LITERATURA

[1] Rakshit Ameta, Meenakshi S. Solanki, Surbhi Benjamin, Suresh C. Ameta, Chapter 6 -

Photocatalysis, Editor(s): Suresh C. Ameta, Rakshit Ameta, Advanced Oxidation Processes for Waste Water Treatment, Academic Press, 2018, Pages 135-175, ISBN 9780128104996

[2] Karuppiah Murugan, Tata N. Rao, Ashutosh S. Gandhi, B.S. Murty, Effect of aggregation of methylene blue dye on TiO₂ surface in self-cleaning studies, Catalysis Communications, Volume 11, Issue 6, 2010, Pages 518-521, ISSN 1566-7367

Nieparametryczna regresja lokalnie ważona jądrem w przewidywaniu toksyczności ostrej mieszanin chemicznych

Michalina Miszczak^{1,2}, Agnieszka Gajewicz-Skrętna¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska
ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

²Naukowe Koło Chemików Uniwersytetu Gdańskiego

michalinalaura@gmail.com

Zanieczyszczenie środowiska jest jednym z głównych problemów XXI wieku. Ze względu na zdolność niektórych substancji do bioakumulacji w tkankach organizmów żywych, mogą one przenikać przez kolejne ogniwa łańcucha troficznego, stanowiąc bezpośrednie zagrożenie dla życia człowieka [1]. Związki chemiczne oddziałują na środowisko głównie pod postacią mieszanin, których złożony charakter jest przyczyną wielkiej ilości dostępnych danych opisujących ich toksyczność [2]. Ze względu na trudności związane z przeprowadzaniem badań eksperymentalnej oceny ryzyka chemicznego zanieczyszczeń, zasadnym wydaje się być zastosowanie metod *in silico*, w tym metody modelowania ilościowej zależności pomiędzy strukturą chemiczną a aktywnością biologiczną (QSAR) [3].

W celu zweryfikowania użyteczności metod uczenia maszynowego bazujących na punktowej aproksymacji w przewidywaniu ostrej toksyczności wodnej wybranych związków chemicznych i ich mieszanin, dokonano analizy porównawczej efektywności modeli QSAR kalibrowanych przy użyciu wybranej klasycznej metody regresji oraz nieparametrycznej regresji lokalnie ważonej jądrem (KwLPR).

Na podstawie analizy wyników wykazano, iż zastosowanie metody nieparametrycznej umożliwiło uzyskanie bardziej poprawnych prognoz toksyczności ostrej niż w przypadku zastosowania klasycznej regresji liniowej. Wyniki te potwierdzają użyteczność metody KwLPR w przewidywaniu toksyczności ostrej mieszanin chemicznych oraz dowodzą wyższości rozważanej nieparametrycznej metody modelowania nad wybraną parametryczną metodą regresji.

LITERATURA

- [1] Yang R.S., Thomas R.S., Gustafson D.L., Campain J., Benjamin S.A., Verhaar H.J., Mumtaz M.M. (1998) Approaches to developing alternative and predictive toxicology based on PBPK/PD and QSAR modeling, *Environ. Health Perspect.*, 106: 1385-1393.
- [2] Chatterjee M., Roy K. (2021) Prediction of aquatic toxicity of chemical mixtures by the QSAR approach using 2D structural descriptors, *J. Hazard Mater.*, 408, 124936.
- [3] Aher R.B., Khan K., Roy K. (2020) A brief introduction to quantitative structure-activity relationships as useful tools in predictive ecotoxicology, *Ecotoxicological QSARs*, Humana Press, 27-53.

Hybrydowe opatrunki na trudno gojące się rany

Myślak Aleksandra¹, Carayon Iga¹

¹*Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, Katedra Technologii Polimerów,
ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk, Polska*

aleksandramyslakk@gmail.com

Leczenie trudno gojących się ran np. ran cukrzycowych, owrzodzeń, ran pooparzeniowych stanowi jedno z głównych wyzwań medycyny XXI wieku. Złoty standard leczenia takich ran, czyli przeszczepy skóry są rozwiązaniem niewystarczającym w stosunku do obecnych potrzeb. Dlatego ważne jest prowadzenie badań naukowych w tym zakresie, które pozwolą na opracowanie nowych rozwiązań leczenia trudno gojących się ran [1]. Zakażenia bakteriami są największym zagrożeniem w leczeniu trudno gojących się ran, dlatego istotne jest wprowadzanie różnych substancji oraz ich mieszanin w strukturę opatrunku, aby zmniejszyć ryzyko zakażenia rany. Do tego celu wykorzystywane są np. antybiotyki. Dzięki temu możliwe jest wydzielanie substancji aktywnej, która zmniejsza ryzyko zakażenia rany np. gronkowcem [1].

Hybrydowy opatrunek, nad którym pracujemy w laboratorium, jest otrzymany z porowatej matrycy powleczonej hydrożelem. Porowata matryca wykonana jest z kompozytu poliuretan–polilaktyd (PUR/PLA), gdzie PLA wprowadzane jest do kompozycji w ilości 10, 20 lub 30%. Hydrożel otrzymany jest z poli(alkoholu winylowego) i boraksu. Dodatkowo został on zmodyfikowany antybiotykiem – ciprofloksacyną.

Analiza zdjęć mikroskopowych wykazała, że porowatość matrycy nie zmienia się istotnie wraz ze wzrostem zawartości PLA w kompozycji (69±2% PUR/10PLA, 73±2% PUR/20PLA, 72±2% PUR/30PLA). Wielkość porów istotnie zmniejsza się wraz ze wzrostem zawartości PLA w kompozycji (123±23µm PUR/10PLA, 92±30µm PUR/20PLA, 68±15µm PUR/30PLA). Porowatość i wielkość porów matrycy jest odpowiednia, aby zapewnić wymianę gazową między raną a środowiskiem zewnętrznym, przy jednoczesnym zachowaniu bariery między środowiskiem rany a środowiskiem zewnętrznym. Z drugiej strony, analiza widm FTIR i przeprowadzone badania mikrobiologiczne z użyciem szczepu bakteryjnego *Staphylococcus aureus* wykazały obecność ciprofloksacyny w strukturze hydrożelu (pasma w zakresie 1674-1627 cm⁻¹, przypisane obecności drgań zginających grupy NH obecnej w ciprofloksacynie) oraz potwierdziły jej działanie antybakteryjne (zaobserwowana strefa zahamowania wzrostu bakterii). Otrzymane hybrydowe materiały posiadają odpowiednią charakterystykę morfologiczną (porowata matryca) i potwierdzone działanie antybakteryjne (hydrożel modyfikowany ciprofloksacyną). Wskazuje to na możliwość ich potencjalnego zastosowania, jako opatrunki na trudno gojące się rany.

LITERATURA

[1] Carayon I., Terebieniec A., Łapiński M., Filipowicz N., Kucińska-Lipka J. (2020) Ciprofloxacin-modified degradable hybrid polyurethane-poly lactide porous scaffolds developed for potential use as an antibacterial scaffold for regeneration of skin. *Polymers*.2020; 12(1): E171

Modelowanie procesu poliaddycji w układzie dwóch monomerów dwufunkcyjnych

Filip Rekas¹, Jaromir Lechowic¹

¹Politechnika Rzeszowska, Wydział Chemiczny, Al. Powstańców Warszawy 6, 35-959 Rzeszów

158179@stud.prz.edu.pl

Poliaddycja jest procesem, zachodzącym pomiędzy grupami funkcyjnymi monomerów dwu- lub wielofunkcyjnych, w trakcie którego otrzymywane są makrocząsteczki. W przeciwieństwie do reakcji polikondensacji, odznaczającej się podobnym mechanizmem, podczas poliaddycji nie jest generowany małowcząsteczkowy produkt uboczny. Klasycznym przykładem takiej polireakcji jest synteza poliuretanów, w której reagują ze sobą alkohole dwufunkcyjne z diizocyjanianami. Produktem reakcji poliaddycji są trwałe cząsteczki, posiadające końcowe grupy funkcyjne, zdolne do dalszej reakcji. Te z kolei mogą reagować z monomerami, bądź ze sobą [1].

W literaturze związanej z fizykochemią polimerów stosowane jest także podobne pojęcie, zwane poliaddycją łańcuchową (polimeryzacją addycyjną), które odnosi się do procesów o mechanizmie łańcuchowym. W tym przypadku dotyczy ono centrów aktywnych, wytworzonych przez katalizator, addycyjnie przyłączających cząsteczki monomerów, których wzrost ma charakter zbliżony do liniowego [2].

W niniejszej pracy modelowano proces poliaddycji rozumiany jako proces o mechanizmie stopniowym, w którym początkowo tworzone są wyłącznie cząsteczki o niewielkiej masie cząsteczkowej – dimery, trimery, tetramery itd. Ich liczba nie jest ściśle określona jak w przypadku procesów łańcuchowych. W polimeryzacji addycyjnej cząsteczki nie rosną równomiernie, a wysoki stopień polimeryzacji otrzymany jest dopiero przy znacznym przereagowaniu układu. Zależność średniego stopnia polimeryzacji cząsteczek od stopnia przereagowania układu ma tutaj charakter nieliniowy, opisywany przez funkcje wykładniczą.

W pracy opracowano model procesu poliaddycji, w którym reakcje przebiegają bez wydzielenia małowcząsteczkowego produktu ubocznego i realizowane są przy udziale dwóch rodzajów monomerów A_2 oraz B_2 o niezmienną się reaktywność grup funkcyjnych. Otrzymane rozkłady sekwencji merów dla pewnej liczby cząsteczek przedstawiono graficznie w postaci diagramów.

LITERATURA

[1] Odian G., Principles of polymerization, John Wiley & Sons, New Jersey, 2004

[2] Jones R. et al., Compendium of Polymer Terminology and Nomenclature, The Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK, 2009

Ocena składu chemicznego ekstraktów z kminku zwyczajnego (*Carum carvi* L.) i fenkułu włoskiego (*Foeniculum vulgare* Mill.) i ich aktywności antygrzybowej wobec *Fusarium oxysporum*

Bartosz Ryl¹, Emilia Malkusz¹

¹ Uniwersytet Opolski, Wydział Przyrodniczo-Techniczny, Instytut Inżynierii Środowiska i Biotechnologii
46-022 Opole, ul. Kominka 6a

bartoszryl@gmail.com

W ostatnich latach szczególne znaczenie ma ograniczanie rozwoju fitopatogenów z wykorzystaniem olejków eterycznych. Celem pracy było otrzymanie ekstraktów z owoców kminku zwyczajnego (*Carum carvi* L.) i fenkułu włoskiego (*Foeniculum vulgare* Mill.) metodą ekstrakcji ciągłej w aparacie Soxhleta i ocena ich działania grzybobójczego wobec *Fusarium oxysporum*.

Materiał badawczy stanowił szczep *F. oxysporum* wyizolowany z porażonych ziarniaków pszenicy i ekstrakty z owoców fenkułu włoskiego i kminku zwyczajnego. Ekstrakty roślinne otrzymano metodą ekstrakcji ciągłej w aparacie Soxhleta z wykorzystaniem chlorku metylenu jako rozpuszczalnika. Skład chemiczny oznaczono metodą GC-MS. Ocenę wrażliwości *F. oxysporum* na ekstrakty roślinne przeprowadzono metodą zatruwania podłoż. Metodą hodowlaną oceniono również efekt biobójczy (grzybobójczy/grzybostatyczny).

Uzyskane ekstrakty, pomimo że pochodziły z owoców roślin należących do rodziny Apiaceae wyraźnie różniły się składem chemicznym. W ekstrakcie z kminku zwyczajnego dominowały karwon ($59,691 \pm 0,137$) i limonen ($33,036 \pm 0,313$), a w ekstrakcie z fenkułu - trans-anetol ($76,98 \pm 0,042$) i fenchon ($13,81 \pm 0,046$). Testowane ekstrakty niezależnie od stężenia hamowały wzrost *F. oxysporum*, ale skuteczniej działał ekstrakt z fenkułu. Całkowite zahamowanie wzrostu grzyba wystąpiło przy zastosowaniu ekstraktu z fenkułu o stężeniach 1,0, 1,5 i 2,0%, natomiast ekstrakt z kminku zwyczajnego wykazywał takie działanie w wyższych stężeniach. Wykazano, że ekstrakty o podanych wyżej stężeniach działały grzybobójczo.

Synteza i badanie właściwości fluoroscencyjnych pochodnych imidowych

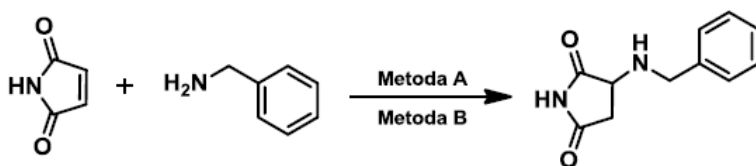
Paulina Sroka¹, Szymon Jarzyński¹

¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej
Tamka 12 91-403 Łódź

paulina.sroka@edu.uni.lodz.pl

W ostatnich latach można zauważyć rosnące zainteresowanie syntezą fluoryzujących związków organicznych. Stanowią one obiekt zainteresowania chemików na całym świecie ze względu na ich różnorodne zastosowania w wielu dziedzinach nauki i życia m.in. w mikroskopii fluorescencyjnej, w technologii OLED czy też w sondach fluorescencyjnych. Jednak duża liczba dostępnych barwników fluorescencyjnych absorbuje/emituje w zakresie 300-600nm, co w konsekwencji znacznie ogranicza ich zastosowanie w medycynie. Z tego też powodu niezwykle pożądane są barwniki, które będą wykazywały właściwości fotofizyczne w obszarze bliskiej podczerwieni i charakteryzujące się dużymi przesunięciami Stokesa. [1]

Przedstawiony projekt naukowy dotyczył syntezy oraz badania właściwości fotofizycznych nowych fluoroforów. W ciągu ostatnich lat ukazało się wiele publikacji, w których udowodniono, że pochodne sukcyinoimidu i maleimidu wykazują silną i zależną od środowiska fluorescencję.[2] Głównym celem projektu było opracowanie prostej i efektywnej metody syntezy pochodnych sukcyinoimidu, który osiągnięto w wyniku reakcji maleimidu z pierwszo- i drugorzędowymi aminami. Oczekiwane produkty uzyskano przy zastosowaniu tradycyjnej metody z wykorzystaniem rozpuszczalników organicznych (Metoda A) oraz metody mechanochemicznej przy wykorzystaniu młyna kulowego (Metoda B).



Rys. 1. Reakcja maleimidu z benzyloaminą.

LITERATURA

- [1] T. M. Figueira-Duarte, K. Müllen *Chem. Rev.*, 2011, *111*, 7260-7314; b) D. Chercka, S. -J. Yoo, M. Baumgarten, J. -J. Kim, K. Müllen *J. Mater. Chem. C*, 2014, *2*, 9083-9086
[2] A. B. Mabire, M. P. Robin, W. -D. Quan, H. Willcock, V. G. Stavros, R. K. O'Reilly *Chem. Commun.* 2015, *51*, 9733-9736; b) Y. Xie, J. T. Husband, M. Torrent-Sucarrat, H. Yang, W. Liu, R. K. O'Reilly *Chem. Commun.* 2018, *54*, 3339-3342.

Nanocząstki metali-skuteczna metoda zwalczania patogenów

Beata Szreniawa¹

*¹Politechnika Krakowska, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Katedra Technologii Chemicznej
i Analityki Środowiskowej
ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków*

beata.szreniawa@interia.pl

Rozwój nauki oraz wzrost świadomości społeczności na temat konieczności zwalczania patogenów pozwala na pozyskiwanie preparatów posiadających właściwości biobójcze.

Cel badań stanowiła ocena właściwości antymikrobiologicznych produktów zawierających nanocząstki miedzi przeciwko szczepowi grzyba *Aspergillus niger*.

Kompozycje otrzymywano poprzez mieszanie za pomocą mieszadła mechanicznego wodnych składników do chwili uzyskania jednolitego roztworu w postaci białej piany. Bazę badań stanowił plan frakcyjny. Otrzymane produkty w formie zestalonej poddano analizie SEM-EDS. Dokonano także pomiaru wielkości cząstek metodą DLS. Przeprowadzono także badania właściwości biobójczych wobec szczepu grzyba *Aspergillus niger* ilościową metodą zawiesinową.

Na podstawie fotografii otrzymanych dzięki analizie metodą SEM-EDS określono skład pierwiastkowy wybranego materiału. Na podstawie widm otrzymanych w wyniku przeprowadzenia analizy metodą DLS określono dominujący rozmiar cząstek. Wykonano zdjęcia poglądowe obrazujące wzrost drobnoustroju *Aspergillus niger* w celu dokonania oceny stopnia skuteczności nanocząstek miedzi biorąc pod uwagę parametr- czas inkubacji.

Wykazano, że metoda redukcji chemicznej pozwala na otrzymanie nanocząstek miedzi. Wyższe stężenie nanocząstek miedzi prowadzi do zwiększenia efektu biobójczego kompozycji. Wyższa temperatura oraz pH otrzymywania kompozycji determinują jej lepsze właściwości antymikrobiologiczne.

Niezwykłe nanocząstki tellurku cynku

Alicja Szymska¹

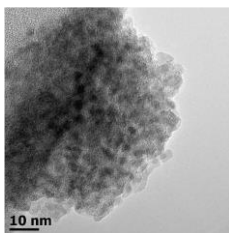
¹*Politechnika Krakowska, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej,
Katedra Biotechnologii i Chemii Fizycznej,
ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków*

mail: alaszymska@gmail.com

Tematem powyższej pracy są nanocząstki tellurku cynku o ultra-małych rozmiarach. W pierwszej kolejności scharakteryzowane zostaną nanocząstki o magicznych rozmiarach, następnie nanocząstki tellurku cynku. Omówiona zostanie ich charakterystyka oraz sposoby syntezy. Podczas prezentacji zaprezentowane zostaną cele, etapy oraz wyniki przeprowadzonych badań.

Plan pracy badawczej zawierał optymalizację procesu otrzymywania i oczyszczania nanocząstek tellurku cynku (ZnTe). W pierwszym etapie prac badawczych zoptymalizowano temperaturę prowadzenia procesu, poprzez prowadzenie syntez w różnych temperaturach. W kolejnym etapie pracy badawczej zoptymalizowano czas prowadzenia procesu. Na każdym etapie syntezy nanocząstki poddawano analizie. Nanocząstki badano przy pomocy wybranych metod badawczych jak UV-VIS, FT-IR, TEM oraz DLS, poddano je również analizie emisji i ekscytacji. W ostatnim etapie badań nanocząstki wytrącono oraz oczyszczono.

Celem badań było określenie wpływu temperatury i czasu syntezy na otrzymywanie dobrych jakościowo nanocząstek tellurku cynku. Wykazano, że temperatura oraz czas procesu mają znaczący wpływ na jakość otrzymanych nanomateriałów. Analiza wyników wykazała, iż niskie temperatury wpływają na zmniejszenie intensywności luminescencji otrzymanych nanocząstek ZnTe. Wysokie temperatury również nie były korzystne dla procesu, ponieważ syntezowane nanocząstki wykazywały zmniejszoną luminescencję. Ponadto wysokie temperatury wpływały na szybsze utlenienie się nanocząstek. Nanocząstki podczas syntezy łatwo się utleniały, a więc traciły cechy dobrego materiału. Proces należało prowadzić w kontrolowanych warunkach temperaturowych bez dostępu tlenu. Przeprowadzone badania doprowadziły do zoptymalizowania syntezy i otrzymania wysokiej klasy nanomateriałów. Otrzymane nanocząstki o wielkości 3 nm do 5 nm charakteryzowały się silną luminescencją, wykazywały również skłonność do aglomeracji.



Rys. 1. Obraz TEM nanocząstek ZnTe.

Podwójne ciecze jonowe jako związki o budowie amfifilowej

Marta Wojcieszak¹, Tomasz Rzemieniecki¹, Anna Syguda¹, Katarzyna Materna¹

¹Politechnika Poznańska, Wydział Technologii Chemicznej, Zakład Technologii Chemicznej
Berdychowo 4, 60-965 Poznań

marta.d.wojcieszak@doctorate.put.poznan.pl

Herbicydowe ciecze jonowe (ang. *Herbicidal Ionic Liquids, HILs*) są to związki o temperaturze topnienia poniżej 100°C, zawierające anion o aktywności chwastobójczej. Substancje te wykazują znikomą prężność par, wysoką stabilność termiczną oraz elektrochemiczną. HILs ze względu na charakter jonowy nie emitują par co w konsekwencji powoduje, że są praktycznie nielotne. Strukturę herbicydowych cieczy jonowych można zaprojektować, tak aby uzyskać odpowiednie właściwości fizykochemiczne, np. lepkość, aktywność powierzchniową czy biologiczną. Zazwyczaj kation w tych związkach ma budowę amfifilową, co umożliwia tworzenie samoorganizujących się micel [1].

Celem badań było określenie aktywności powierzchniowej podwójnych herbicydowych cieczy jonowych z kationem alkilo[2-(2-hydroksyetyloksy)etylo]dimetylo-amoniowym. Aktywność powierzchniowa zbadana została na podstawie pomiarów napięcia powierzchniowego oraz kąta zwilżania. Parametrami wyznaczonymi na podstawie otrzymanych wyników, które pozwoliły określić aktywność powierzchniową roztworu są: krytyczne stężenie micelowania (CMC), równowagowe napięcie powierzchniowe (γ_{CMC}) oraz sprawność obniżania napięcia powierzchniowego (pC_{20}). Do zbadania kątów zwilżania posłużyła metoda siedzącej kropli. Badania wykonane zostały na hydrofobowej powierzchni parafiny oraz na powierzchniach układów biologicznych jakim były liście chabra bławatka (*Centaureacyanus*) oraz rzepaku ozimego (*Brassica napus*).

LITERATURA

[1] Rzemieniecki T, Wojcieszak M, Materna K, Praczyk T, Pernak J (2021) Synthetic auxin-based double salt ionic liquids as herbicides with improved physicochemical properties and biological activity. *J Mol Liq* 334: 116452-1–116452-15

Computational approach to the behaviour of ions and water molecules in artificial membrane channel

Kamil Wojtkowiak¹, Aneta Jezierska¹, Jarosław J. Panek¹

¹*Faculty of Chemistry, University of Wrocław, Research Group of Structure and Dynamics of Macrosystems, ul. F. Joliot Curie 14, 50-383 Wrocław, Poland*

kamil.wojtkowiak@chem.uni.wroc.pl

Proteins forming transmembrane channels and pores are crucial elements of the cellular homeostasis systems. These proteins are responsible for transport of molecules and ions to and from the living cell. A striking example of the power of contemporary protein design capabilities is a recent report on the computational design of protein pores built from two (concentric) rings formed by α -helical structures [1]. The resulting pores built from 12 or 16 helices exhibited selective transport properties (i.e. potassium over sodium) [1].

The current study aims at resolving several issues: (a) what is the magnitude of the interaction between the water molecules or ions and the protein channel; (b) is it possible for the structure of the pore to remain stable in the gas phase conditions; (c) how fast is the dynamics of the objects passing through the channel. For this purpose, molecular dynamics simulations were carried out using the AMBER 18 program [2] and the Amber ff14SB force field. Additional insight was gained using the xTB 6.3 program for the GFN2-xTB Density Functional Tight Binding and GFN-NN force field techniques [3].

Acknowledgments:

The Authors gratefully acknowledge generous grants of the CPU time allocated in the Wrocław Centre for Networking and Supercomputing (WCSS), the Centre of Informatics Tricity Academic Supercomputer & Network in Gdańsk (CI TASK), and Prometheus, part of the PLGrid Infrastructure of the Academic Computer Centre Cyfronet AGH in Kraków.

LITERATURA

- [1] G. Reggiano, Y. Hsia, T.J. Brunette, J. Dou, D. Ma, E.M. Lynch, S.E. Boyken, P.-S. Huang, L. Stewart, F. DiMaio, J.M. Kollman, B.F. Luisi, T. Matsuura, W.A. Catterall, D. Baker, *Nature* 585 (2020) 129-134.
- [2] D.A. Case, I.Y. Ben-Shalom, S.R. Brozell, D.S. Cerutti, T.E. Cheatham, III, V.W.D. Cruzeiro, T.A. Darden, R.E. Duke, D. Ghoreishi, M.K. Gilson, H. Gohlke, A.W. Goetz, D. Greene, R. Harris, N. Homeyer, Y. Huang, S. Izadi, A. Kovalenko, T. Kurtzman, T.S. Lee, S. LeGrand, P. Li, C. Lin, J. Liu, T. Luchko, R. Luo, D.J. Mermelstein, K.M. Merz, Y. Miao, G. Monard, C. Nguyen, H. Nguyen, I. Omelyan, A. Onufriev, F. Pan, R. Qi, D.R. Roe, A. Roitberg, C. Sagui, S. Schott-Verdugo, J. Shen, C.L. Simmerling, J. Smith, R. Salomon-Ferrer, J. Swails, R.C. Walker, J. Wang, H. Wei, R.M. Wolf, X. Wu, L. Xiao, D.M. York, P.A. Kollman (2018), AMBER 2018, University of California, San Francisco, USA.
- [3] S. Spicher, S. Grimme, *Angew. Chem. Int. Ed.* 59 (2020) 15665-15673.

Zawartość mikroplastiku pochodzącego z opon w pyłu z jezdni

Jagoda Worek¹, Xymena Badura², Anna Białas¹, Katarzyna Styszko^{1*}

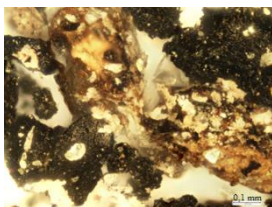
¹ Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica, Wydział Energi i Paliw, aleja Mickiewicza 30, Kraków, Polska

² Instytut Nafty i Gazu-Państwowy Instytut Badawczy, ul. Lubicz 25A, Kraków, Polska

jworek@agh.edu.pl, *corresponding author styszko@agh.edu.pl

Pod koniec lat 40. XX wieku, rozpoczęła się na skalę globalną produkcja tworzyw sztucznych [1,2]. Od tego czasu, ze względu na bardzo szeroki zakres zastosowania, obserwowany jest dynamiczny wzrost ich produkcji. Nie od dziś wiadomo, że działalność człowieka ma duży wpływ na środowisko naturalne. W tym przypadku, pomimo widocznego problemu, związanego z rozpadaniem się tworzyw i ich kumulacji, już na początku lat 70 [3,4] stwierdzono, że szkodliwe konsekwencje wciąż rosną. Nawet w przypadku gdy tworzywa sztuczne przestałyby być produkowane i używane, obecna ilość będzie rozkładać się wieki. Naukowcy głównie skupiają się na zawartości mikroplastiku w wodach, zaniedbując emisje tego zanieczyszczenia do innych środowisk.

W badaniu podjęto się analizy zebranego pyłu z jezdni pod kątem zawartości mikroplastiku z opon samochodowych. Próbkę pochodziły z ruchliwej drogi w okolicy skrzyżowania. Zostały one pobrane w ponad 800 tysięcznym mieście. Do analizy użyto spektroskopii w podczerwieni



Rys. 1. Mikroplastik wyseparowany z pyłu jezdni pod mikroskopem.

Badania wykazały, że w próbkach znajdują się 515 ± 20 mikrodrobin tworzyw sztucznych, z czego ponad 90% stanowią czarne frakcje (Rys.1) pochodzące z opon samochodowych. Wyniki dowodzą, że transport jest jednym z istotnych źródeł zanieczyszczeń środowiska mikroplastikiem

LITERATURA

- [1] A.B. Strong, *Plastics: Materials and Processing*, 3 edition, Prentice Hall; New Jersey, 2006
- [2] A. Dehaut, L. Hermabessiere, G. Duflos, *Current Frontiers and Recommendations for the Study of Microplastics in Seafood*; *TrAC; Trends Anal. Chem.*; 116: 349–359, 2019
- [3] E.J Carpenter, S.J Anderson, G.R Harvey, H.P Miklas, B. P. Bradford, *Polystyrene spherules in coastal waters*; *Science*; 178: 749–750, 1972
- [4] J.B Colton, F.D Knapp, B.R Burns, *Plastic particles in surface waters of the Northwestern Atlantic*; *Science*; 185:491–497, 1974

Synteza 5-azydo-2,3-O-acetylo-1,4-anhydro-D,L-ksylitolu

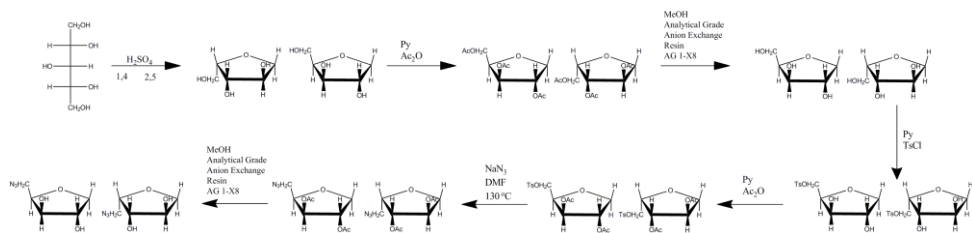
Karolina Wronska¹, Marta Kalińska¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej, Zespół Glikochemii
Ul. Wita Stwosza 63,
80-308 Gdańsk

karolina.wronska@phdstud.ug.edu.pl

Alditole to grupa alkoholi poliwdorotlenowych będących pochodnymi monosacharydów – ketoz oraz aldoz, w których grupa karbonylowa została zredukowana do grupy hydroksylowej. Alditole oraz anhydroalditole znalazły zastosowanie w przemyśle spożywczym, kosmetycznym czy też farmaceutycznym. Coraz większym zainteresowaniem wśród naukowców cieszy się ksylitol, który zapobiega zapaleniu ucha środkowego, osteoporozie czy też próchnicy. Bierze również udział w remineralizacji zębów [1].

W trakcie trwania pierwszego roku studiów doktoranckich zsyntezowałam 5-azydo-2,3-O-acetylo-1,4-anhydro-D,L-ksylitol. Wieloetapowa synteza zakładała m. in. charakterystyczną dla chemii cukrów reakcję odwodnienia, tosylowanie oraz azydowanie [Rys. 1].



Rys. 1. Skrócony schemat przeprowadzonych syntez.

Do potwierdzenia struktury otrzymywanych na poszczególnych etapach produktów wykorzystywałam metody spektroskopowe takie jak IR, NMR oraz MS. Natomiast w celu oczyszczania stosowałam metody klasyczne takie jak krystalizacja oraz chromatografia cieczowa (grawitacyjna, FLASH i HPLC).

LITERATURA

[1] K. Sikora, J. Samaszko-Fierteck, R. Ślusarz, B. Liberek, J. Madaj, B. Dmochowska(2017) Alditole i anhydroalditole. Wiadomości chemiczne: 69-83

Rtęć w chorych rybach z Zatoki Puckiej

Martyna Zakrzewska¹, Agnieszka Jędruch¹, Magdalena Beldowska¹

¹Uniwersytet Gdański, Instytut Oceanografii, Zakład Chemii Morza i Ochrony Środowiska Morskiego
Aleja Marszałka J. Piłsudskiego 46, 81-378 Gdynia

martynazakrzewska@onet.com.pl

Rtęć (Hg) jest jednym z najbardziej niebezpiecznych pierwiastków w środowisku. Jest silną neurotoksyną, niezwykle szkodliwą dla zdrowia ludzkiego. Szczególnie szkodliwe są organiczne formy Hg takie jak metylortęć, która z łatwością wnika do organizmu, pokonuje bariery biologiczne (krew- mózg, krew- łożysko) oraz ulega kumulacji w organach i tkankach. Głównym źródłem Hg w organizmie człowieka jest konsumpcja ryb morskich. Stężenie Hg w rybach jest determinowane przez efektywność procesów bioakumulacji metalu w ich tkankach oraz jego biomagnifikacji w łańcuchu troficznym. Gromadzeniu Hg w tkankach ryb może sprzyjać m.in. ich zły stan fizjologiczny, spowodowany chorobami.

Celem badań było określenie stężenia rtęci całkowitej (Hg_{tot}) oraz sumy jej głównych form organicznych (Hg_{org}) w rybach, na których ciele stwierdzono zmiany chorobowe. Ryby poławiano w 2019 roku w Zatoce Puckiej. Łącznie przebadano 31 osobników: 6 babek byczych (*Neogobius melanostomus*), 7 śledzi (*Clupea harengus*) oraz 18 storni (*Platichthys flesus*). Analizom chemicznym poddane zostały tkanka mięśniowa, wątroba i zmiany chorobowe (np. owrzodzenia, zmiany pigmentacyjne skóry) ryb. Analizę stężenia Hg_{tot} oraz j.w. przeprowadzono metodą termodesorpcji przy użyciu analizatora rtęci DMA-80 [1].

Uzyskane wyniki wykazały, że we wszystkich przebadanych tkankach i narządach chorych ryb stwierdzono obecność Hg_{tot} i Hg_{org} . Stężenia Hg pomierzone w chorych rybach z Zatoki Puckiej były wyższe w porównaniu z wcześniejszymi wynikami badań zdrowych ryb złowionych w tym rejonie. Stężenia Hg_{tot} i Hg_{org} w chorych rybach charakteryzowały się najwyższymi stężeniami Hg spośród ryb odławianych w polskiej strefie ekonomicznej jak i również w innych akwenach Europy. Najwyższe stężenie Hg w chorych rybach pomierzono w tkance mięśniowej. Wartość ta była skorelowana z masą oraz długością ryby. Analogiczne obserwacje poczyniono w przypadku wątroby oraz zmian chorobowych. Pomimo wysokich wartości stężenia Hg w przebadanych tkankach i narządach chorych ryb, nie stwierdzono przekroczenia dopuszczalnej dawki w rybach i owocach morza, wynoszącej od 0,5 mg/kg do 1,0 mg/kg mokrej masy. Oznacza to, że ich konsumpcja nie stanowi zagrożenia dla zdrowia człowieka. W przypadku kilku przebadanych storni stężenie Hg przekraczało jednak wartość 0,3 mg/kg mokrej masy, która jest uznawana za niebezpieczną dla konsumujących je ryb drapieżnych, ptaków i ssaków morskich.

Badania zostały zrealizowane w ramach projektu 2018/31/N/ST10/00214 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki.

LITERATURA

[1] Jędruch A, Beldowska M, Kwasigroch U, Normant-Saremba M, Saniewska D. (2018). Mercury fractionation in marine macrofauna using thermodesorption technique: Method and its application. *Talanta* 189: 534-542.

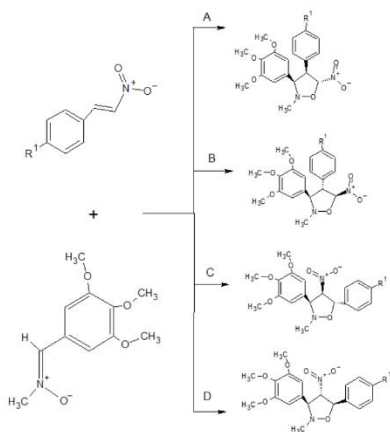
Z-(3,4,5-trimetoksyfenylo-N-metylonitron jako aktywowany nukleofilowo TAC w reakcjach [3+2] cykloaddycji

Klaudia Zareba¹, Radomir Jasiński¹

¹Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej,
Katedra Chemii Organicznej, ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

klaudia.zareba@student.pk.edu.pl

W ramach pracy przeprowadzono teoretyczną analizę reakcji [3+2] cykloaddycji z udziałem Z-(3,4,5-trimetoksyfenylo-N-metylonitronu, jako silnego nukleofila oraz serii 2-arylonitroetenów jako komponentów elektrofilowych. Badane reakcje teoretycznie realizować mogą się na czterech regio- i stereoisomerycznych ścieżkach (A-D) prowadzących do odpowiednich nitroisoxazolidyn. Celem pracy było wskazanie, które z nich powinny być faworyzowane przez charakter lokalnych oddziaływań nukleofil-elektrofil, a które przez czynniki termodynamiczne. Okazało się, że determinanty te z kompletnie rozbieżny sposób prognozują przebieg cykloaddycji.



Rys. 1. Teoretyczne ścieżki reakcji pomiędzy Z-(3,4,5-trimetoksyfenylo-N-metylonitronem a jednopodstawionym E-2-fenylo-1-nitroetenem

POSTERY
POPULARNONAUKOWE



Kolorowy zawrót głowy

Katarzyna Baran¹

*¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Naukowe Koło Chemików
Ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk*

katarzynabaran1105@gmail.com

Wypielęgnowane i odpowiednio wystylizowane włosy są podstawowym elementem zadbanego wyglądu. Wiele osób rozpoczynających przygodę z farbowaniem ma na celu zniwelowanie siwizny, która potęguje się wraz ze stresującym trybem życia.[1]

Początki farb do włosów przypisujemy na początek XX wieku. Początkowo składała się ona tylko z 4 składników: aniliny, azotanu srebra, pirogalolu oraz octanu ołowiu. Dziś część z nich jest zakazana podczas produkcji kosmetyków, a ilość obecnych substancji barwiących włosy jest znacznie większa.[2] Wiele osób nie zastanawia się nad skutkami farbowania oraz nie analizuje składu tych substancji. W 2013 przeprowadzono badania wykazujące, że każda substancja obecna w składzie jest szkodliwa bądź uczulająca.[3]

Naturalny kolor włosów jest uwarunkowany obecnością eumelaniny i feomelaniny. Pierwszy z tych barwników po poddaniu reakcji z tyrozyną wykazuje barwę brązową lub czarną, zaś drugi determinuje kolor żółty. Używając farb do włosów powodujemy stałą zmianę barwy wykorzystując syntetyczne barwniki oksydacyjne.[4]

LITERATURA

- [1] Pasko A, Colorful dizziness - about the success of hair dyes, 2018
- [2] Turek K, Rynek kosmetyków pielęgnacyjnych, 2007, s.46, 48-64
- [3] Polek Ż, Analiza składu farb do włosów pod kątem zawartości składników o znanym potencjale uczulającym, 2014
- [4] Łopusiewicz Ł, Lisecki L, „Czarne złoto- melaniny w życiu człowieka”, 2016, s. 624

CBD w leczeniu uzależnienia od kokainy

Konrad Barnowski¹

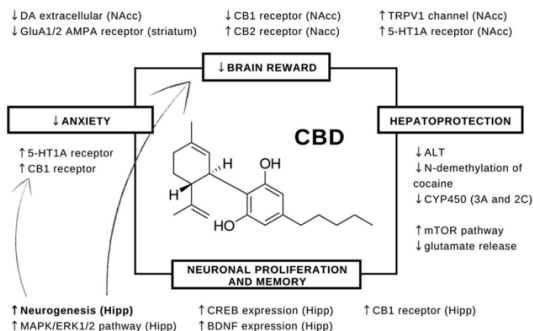
¹Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Naukowe Koło Chemii Medycznej i Środowiskowej
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

konrad.barnowski@student.uj.edu.pl

Kannabidiol (CBD) w ostatnich latach jest bardzo medialnym związkiem, głównie ze względu na legalność w porównaniu do jego psychoaktywnego izomeru - tetrahydrokannabinolu (THC). W tym przypadku za medialnością idzie również rzeczywiste działanie terapeutyczne – kannabidiol może znaleźć zastosowanie w leczeniu epilepsji, proteinopatii (m.in. zespołów Huntingtona czy Alzheimer) czy uzależnień, w tym od kokainy.

CBD potencjalnie zmniejsza częstotliwość zażywania kokainy, odczuwaną „nagrodę” oraz niepokój po jej spożyciu. Związek ten wykazuje również działanie hepatoprotekcyjne i przeciwdrgawkowe (Rys. 1). Z drugiej strony kannabidiol może zwiększać stężenie kokainy w mózgu i krwi, jednak negatywne tego skutki zostają osłabione przez wspomniane działania CBD oraz jego właściwości przeciwlękowe, przeciwpyschotyczne i neuroprotektyjne.

Obecnie mechanizm działania CBD w leczeniu uzależnienia od kokainy nie został całościowo poznany, a dostępne badania zostały przeprowadzone jedynie na zwierzętach (badania z udziałem ludzi trwają, nie zostały jednak jeszcze zakończone), co podkreśla znaczenie kolejnych badań w tym zakresie.



Rys. 1. Możliwe cele działania CBD dotyczące skutków wywoływanych kokainą [1]

LITERATURA

- [1] Rodrigues L A, Silva Caroba M E, Taba F K, Filev R, Gallassi A D (2020) Evaluation of the potential use of cannabidiol in the treatment of cocaine use disorder. A systematic review. Pharm Biochem Beh 196: 172982
- [2] Franco V, Bialer M, Perucca E (2021) Cannabidiol in the treatment of epilepsy: Current evidence and perspectives for further research. Neuropharm 185: 108442
- [3] Dash R, Ali Ch, Jahan I., Munni Y. A, Mitra S, Hannan A, Timalsina B, Oktaviani D. F, Choi H. J, Moon I. S (2021) Emerging potential of cannabidiol in reversing proteinopathies. Ag Res Rev 65 101209

Toksyczność karbamazepiny w środowisku a globalne ocieplenie

Katarzyna Bethke¹, Magda Caban¹, Piotr Stepnowski¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Analizy Środowiska
ul. Jana Bażyńskiego 8, 80-309 Gdańsk

katarzyna.bethke@phdstud.ug.edu.pl

Wzrost temperatury na ziemi oraz zakwaszenie środowiska wodnego wskutek spadku pH to jedne z wielu następstw globalnego ocieplenia. Owa ingerencja w środowisko w znaczący sposób oddziałuje na organizmy wodne, takie jak krewetki i małże, wywołując wzmożony stres i zmiany w metabolizmie tych istot. Naukowcy dowiedli również, że zmiany klimatu mogą oddziaływać negatywnie na organizmy wodne pośrednio, poprzez zmianę toksyczności farmaceutyków obecnych w środowisku, m.in. karbamazepiny – leku przeciwpadaczkowego [1]. Badając toksyczność karbamazepiny w prognozowanych warunkach środowiskowych (obniżone pH, podwyższona temperatura) względem organizmów wodnych, naukowcy przeprowadzają standardowe testy toksykologiczne, m.in. wg wytycznych EPA [2]. Pozwala im to na wyznaczenie i porównanie wartości LC50 (stężenie leku, powodujące śmierć 50% danej populacji w określonych warunkach). Dla krewetki słodkowodnej *Atyaephyra desmarestii* wzrost temperatury z 20°C do 25°C spowodował wzrost toksyczności karbamazepiny, a tym samym zwiększenie śmiertelności badanych organizmów ($LC50_{20^{\circ}C} = 94,3 \text{ mg/l}$; $LC50_{25^{\circ}C} = 66,4 \text{ mg/l}$). Uczni biorą również pod uwagę m.in. takie parametry jak częstość oddechów na minutę, czy rezerwy lipidów. Nie bez znaczenia jest również monitorowanie stresu oksydacyjnego badanych organizmów pod wpływem farmaceutyku [3]. Możliwe jest to dzięki biomarkerom enzymatycznym, np. dysmutazie ponadtlenkowej, czy katalazie, dla których spadek pH i wzrost temperatury może mieć negatywny wpływ poprzez obniżenie ich zdolności antyoksydacyjnych. Kontroluje się również obecność markerów uszkodzeń wywołanych stresem oksydacyjnym oraz aktywność markerów neurotoksyczności [1]. Jest nim np. acetylocholinoesteraza, która pod wpływem połączonych stresorów (karbamazepina oraz obniżone pH / podwyższona temperatura) może zwiększyć swoją aktywność, świadcząc o wzmożonym działaniu neurotoksycznym.

LITERATURA

- [1] M. Mezzelani, A. Nardi, I. Bernardini, M. Milan, L. Peruzza, G. d'Errico, D. Fattorini, S. Gorbi, T. Patamello, F. Regoli, Environmental pharmaceuticals and climate change: The case study of carbamazepine in *M. galloprovincialis* under ocean acidification scenario, *Environ. Int.* 146 (2021) 106269. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2020.106269>.
- [2] E. Nieto, M. Hampel, E. González-Ortegón, P. Drake, J. Blasco, Influence of temperature on toxicity of single pharmaceuticals and mixtures, in the crustacean *A. desmarestii*, *J. Hazard. Mater.* 313 (2016) 159–169. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2016.03.061>.
- [3] R. Freitas, Á. Almeida, V. Calisto, C. Velez, A. Moreira, R.J. Schneider, V.I. Esteves, F.J. Wrona, A.M.V.M. Soares, E. Figueira, How life history influences the responses of the clam *Scrobicularia plana* to the combined impacts of carbamazepine and pH decrease, *Environ. Pollut.* 202 (2015) 205–214. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2015.03.023>.

DNA Origami – od sieci DNA do Mona Lisy

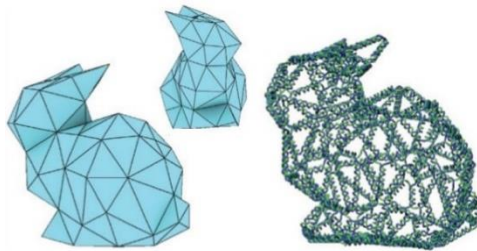
Dajana Dominiak¹

¹Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Wydział Biochemii, Biofizyki i Biotechnologii,
Zakład Biochemii Komórki, Gronostajowa 7, 30-387 Kraków

dajana.dominiak@student.uj.edu.pl

DNA pełni niepodważalnie ważną rolę w świecie bionanotechnologii. Jest to jeden z podstawowych materiałów budulcowych do konstruowania obiektów w nanoskali. Pierwsze warte wspomnienia próby manipulowania kształtem tworzonych struktur DNA sięgają lat 80. Wtedy to Seeman opublikował próby tworzenia rozleglejszych obiektów, takich jak sieci, składających się z krzyżujących się podwójnych nici kwasu nukleinowego [1].

Od tego czasu dokonano ogromnego postępu w tej dziedzinie nauki. Dziś możliwe jest tworzenie znacznie bardziej skomplikowanych struktur, takich jak miniaturowa Mona Lisa, czy trójwymiarowy królik [2][3]. Prezentowany przegląd ma za zadanie przybliżyć krótko historię DNA origami wraz z ciekawszymi współczesnymi przykładami. Odpowiada także na pytanie, jaką korzyść niesienie ze sobą możliwość tworzenia tak różnorodnych struktur.



Rys. 1. Różne reprezentacje modelu (płaszczyzny oraz ostateczna forma złożona z DNA) origami DNA w formie królika [3].

LITERATURA

- [1] Seeman, N. C. (1982). Nucleic acid junctions and lattices. *Journal of Theoretical Biology*, 99(2), 237–247.
- [2] Tikhomirov, G., Petersen, P., & Qian, L. (2017). Fractal assembly of micrometre-scale DNA origami arrays with arbitrary patterns. *Nature*, 552(7683), 67–71.
- [3] Benson, E., Mohammed, A., Gardell, J., Masich, S., Czeizler, E., Orponen, P., and Högberg, B. (2015). DNA rendering of polyhedral meshes at the nanoscale. *Nature* 523, 441–444.

1,4-Dihydropirydyny – otrzymywanie i charakterystyka wybranych pochodnych oraz omówienie ich aktywności biologicznej

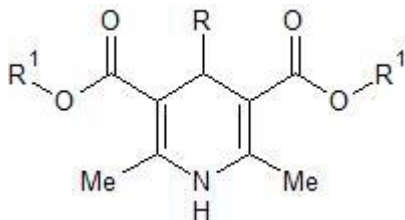
Marta Kalińska¹, Karolina Wrońska¹, Andrzej Nowacki¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

martakali.98@wp.pl

1,4-Dihydropirydyny to związki chemiczne zawierające sześcioczłonowy pierścień heterocykliczny, z atomem azotu w pierwszej pozycji. Przy doborze odpowiednich reagentów istnieje możliwość różnych podstawień pierścienia, już na etapie jego konstruowania. Cząsteczki 1,4-dihydropirydyny w zależności od podstawienia wykazują różne aktywności farmakologiczne, m.in.: obniżające ciśnienie krwi, przeciwnowotworowe, przeciwzapalne, przeciwgruźlicze, przeciwbólowe, a także przeciwzakrzepowe. [1]

Jedną z pierwszych poznanych metod syntezy 1,4-dihydropirydyny jest reakcja Hantzscha, a otrzymany w niej związek chemiczny nazywany jest pirydyną lub estrem Hantzscha (Rys.1). W oryginalnie przedstawionej przez Arthura Hantzscha syntezie biorą udział trzy składniki: ester acetylooctowy, benzaldehyd oraz amoniak lub sole amonowe, a reakcja przebiega we wrzącym metanolu. [2]



Rys. 1. 1,4-dihydropirydyna Hantzscha.

W niniejszej prezentacji przedstawiono mechanizm syntezy 1,4-dihydropirydyn w reakcji Hantzscha oraz charakterystykę wybranych pochodnych.

LITERATURA

- [1] G.Swarnalatha, G.Prasanthi, N.Sirisha, C.Madhusudhana Chetty (Jan-Mar 2011) 1,4-Dihydropyridines: A Multifunctional Molecule- A Review. International Journal of ChemTech Research, Vol.3, No.1, pp 75-89
- [2] Anil Saini, Sanjay Kumar and Jagir S Sandhu (February 2008) Hantzsch reaction: Recent advances in Hantzsch 1,4-dihydropyridines, Journal of Scientific & Industrial Research, Vol. 67, pp.95-111

Czy produkcja papieru jest przyjazna środowisku?

Katarzyna Klimsiak¹

*¹Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, Naukowe Koło Chemików Studentów Politechniki Gdańskiej,
Ul. Gabriela Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk*

s177428@student.pg.edu.pl

Z uwagi na znaczny wzrost zanieczyszczenia środowiska odpadami plastikowymi, znaczna liczba osób stara się zadbać o naszą planetę przez zmniejszenie ich zużycia. W tym celu coraz częściej plastikowe opakowania lub torby zastępuje się papierowymi. Istnieje jednak pytanie – na ile produkcja papieru jest przyjazna środowisku? Wiele osób zwraca uwagę na dużą ilość CO₂ uwalnianego w jego trakcie i przyczyniającego się do globalnego ocieplenia, ale czy naprawdę jest on tak dużym problemem w tym przemyśle?

W prezentacji autor omówi trend dotyczący zużycia papieru w ostatnich latach, przedstawi sposoby jego wytwarzania oraz metody odzysku surowców w jego trakcie. Zostanie również przedstawiona emisja gazów cieplarnianych emitowanych przez przemysł celulozowo – papierniczy. Omówione zostaną także ścieki powstałe w procesie, oraz sposoby ich oczyszczenia.

Rozwój immunoterapii nowotworowej – rozwój inhibitorów checkpointu immunologicznego PD-1/PD-L1

Jan Konopka¹

¹*Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, ul. Gronostajowa 2, 30-387, Kraków*

Jan00.konopka@student.uj.edu.pl

W ostatnich latach, na świecie poczyniono bardzo duży rozwój immunoterapii nowotworowej. Przełomowym momentem było odkrycie, że blokada tzw. checkpointu immunologicznego PD-1/PD-L1 umożliwia nakierowanie i nasilenie limfocytów T do cytotoksyczności na komórki objęte tą inhibicją, w tym właśnie komórki niektórych nowotworów. [1]

Dotychczasowe badania doprowadziły do otrzymania wielu typów i podtypów inhibitorów PD-L1. Nie uzyskano może jeszcze tryumfalnego „leku na raka”, jednak kilka spośród tych związków wykazało obiecujące właściwości. Odkryto także mechanizm działania tych inhibitorów zarówno poprzez wpływ na pathway PD-L1, a także poprzez dimeryzację samych PD-L1. [2] Bez wątplenia bardzo obiecującą rodziną związków są związki BMS, takie jak BMS-1001, czy BMS-1166. [3] Dalsza ich modyfikacja może doprowadzić do zwiększenia udziału immunoterapii w chorobach nowotworowych.

LITERATURA

- [1] Suzanne L Topalian , Charles G Drake and Drew M Pardoll, Targeting the PD-1/B7-H1(PD-L1) pathway to activate anti-tumor immunity, *Current Opinion in Immunology* 2012, 24:207–212
- [2] Christian Bailly, Gérard Vergoten, Protein homodimer sequestration with small molecules: Focus on PD-L1, *Biochemical Pharmacology*, Volume 174, April 2020, 113821
- [3] L. Skalniak, K. M. Zak, K. Guzik, K. Magiera, B. Musielak, M. Pachota, B. Szelazek, J. Kocik, P. Grudnik, M. Tomala, S. Krzanik, K. Pyrc, A. Dömling, G. Dubin and T. A. Holak, Small-molecule inhibitors of PD-1/PD-L1 immune checkpoint alleviate the PD-L1-induced exhaustion of T-cells, *Oncotarget*, 2017, Vol. 8, (No. 42), pp: 72167-72181

Mikroplastik w kosmetykach – realne zagrożenie środowiska

Agata Kowalska¹, Elżbieta Adamska¹, Beata Grobelna¹

¹ *Wydział Chemii Uniwersytetu Gdańskiego, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk*

agata.kowalska1098@gmail.com

Terminem mikroplastik określa się mikrogranulki, czyli cząstki stałe wykonane z tworzywa sztucznego do wielkości 5 mm, które nie są rozpuszczalne w wodzie. Cząstki tworzyw sztucznych dodaje się do preparatów kosmetycznych, które mają na celu złuszczenie bądź oczyszczanie skóry. Mikroplastik znajduje się między innymi w takich produktach kosmetycznych jak: peelingi, pasty do zębów, żele do mycia ciała i twarzy czy lakierach do włosów. [1]

Warto podkreślić, że mikroplastik stanowi niebezpieczeństwo głównie dla środowiska. Codzienne stosowanie kosmetyków, które zawierają w swoim składzie mikrogranulki tworzyw sztucznych jest powodem przedostawania się mikroplastiku do środowiska wodnego. Proces rozpoczyna się poprzez splukiwanie pozostałości kosmetyków, które na początku trafiają do wód ściekowych, a następnie przedostają się do ekosystemu morskiego, gdzie startuje cały łańcuch niekorzystnego oddziaływania na środowisko. W zależności od gęstości, mikroplastik zagraża różnym sferom ekosystemu. Polimery syntetyczne o małej gęstości są unoszone na powierzchni wody, co stanowi go niebezpiecznym dla małych ryb i zooplanktonu. Natomiast polimery syntetyczne o dużej gęstości opadają na dno akwenu i mogą zostać połknięte przez morskie zwierzęta. Mikroplastik charakteryzuje się dużą powierzchnią właściwą, która wykazuje zdolność adsorpcji substancji toksycznych (między innymi polichlorowanych bifenyli PCBs), które mogą kumulować się w organizmach zwierzęcych. Cząsteczki mikroplastiku mogą również kumulować się w organizmie człowieka poprzez spożywanie takich ryb, ale także poprzez picie skażonej wody.[2]

Mikrogranulki pochodzące z produktów kosmetycznych stanowią niewielki udział ogółu zanieczyszczeń środowiska morskiego spowodowanego mikroplastikiem, według badań jest to 0,1% - 4,1% w skali roku. Prowadzone są także badania, które wskazują, że zanieczyszczenie środowiska lądowego jest aż od 4 do 23 razy większe niż środowiska wodnego. Głównie spowodowane jest to wykorzystywaniem osadów ściekowych zawierających mikroplastik jako nawóz do gleby. [3]

LITERATURA

[1] D.Rembisz (2019) Mikroplastiki – mały wielki problem, *Kwartalnik Chemiczny*

[2] B.Grobelna (2017) Mikroplastiki w kosmetykach – surowce zastępcze

[3] M.Krzyżostan (2021) Mikroplastiki w kosmetykach – update legislacyjny

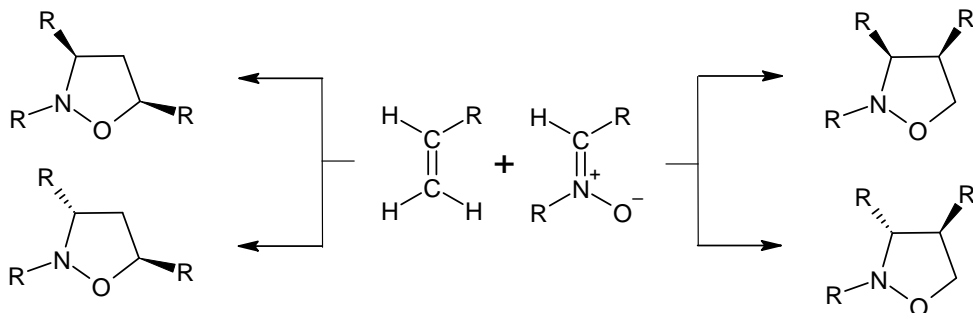
Regio- i stereoselektywna synteza heterocykli na drodze [3+2] cykloaddycji

Jowita Kras¹, Radomir Jasiński¹

¹Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, C2-Katedra Chemii Organicznej; ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

jowitakras1@gmail.com

Najbardziej uniwersalną metodą syntezy pięciocłonowych związków heterocyklicznych są procesy [3+2] cykloaddycji (32CA). Reakcje te realizują się w następstwie oddziaływań związków zawierających trzyatomowy fragment reaktywny (TAC), dawniej określanych jako 1,3-dipole, oraz etylenu/acetyleny oraz ich analogów i heteroanalogów. Jedynie proste reakcje z udziałem np. ozonu i etylenu, przebiegają na jednej tylko reakcyjnej ścieżce. Zazwyczaj, teoretycznie możliwych kanałów [3+2] cykloaddycji jest więcej: dwa, a zazwyczaj cztery. Jest to wynikiem niesymetrycznej budowy nienasyconych komponentów reakcji. Jeśli czynniki steryczne nie wpływają istotnie na sposób zbliżenia się do siebie centrów reakcyjnych, to regiochemia cykloaddycji zdeterminowana jest zazwyczaj lokalnymi oddziaływaniami nukleofil-elektrofil. Stereochemia jest natomiast zazwyczaj skutkiem elektronowych oddziaływań dalekiego zasięgu – takich, które nie stymulują tworzenia nowych wiązań chemicznych, ale mogą ułatwiać/utrudniać zbliżanie się do siebie segmentów reagujących cząsteczek.



Rys. 1. Schemat syntezy na drodze [2+3] cykloaddycji, prowadzący do otrzymania regio- i stereoisomerycznych produktów.

LITERATURA

- [1] Radomir Jasiński „Reakcje 1,3-dipolarnej cykloaddycji: aspekty mechanistyczne I zastosowanie w syntezie organicznej”, RTN Radom 2015, 32-36.
[2] IUPAC. Kompendium Terminologii Chemicznej, wyd. („Złota Księga”). Opracowane przez AD McNaught i A. Wilkinson. Publikacje naukowe Blackwell, Oksford (1997). Wersja online (2019-) stworzona przez SJ Chalka. ISBN 0-9678550-9-8

Wpływ antybiotyków na sinice *Microcystis aeruginosa*

Klaudia Kropidłowska¹, Magda Caban¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Analizy Środowiska,
ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

klaudia.kropidlovska@phdstud.ug.edu.pl

Wzmóżone zakwity sinic są obserwowane w różnych zbiornikach wodnych na całym świecie. Stanowią one narastający problem, gdyż powodują niedotlenienie żyjących tam organizmów, nadają wodzie nieprzyjemny zapach i smak oraz wytwarzają niebezpieczne dla ludzi i środowiska toksyny. Jednym z bardzo rozpowszechnionych gatunków sinic wydzielających toksyczne substancje jest *Microcystis aeruginosa*, którego toksyny w ilościach środowiskowych powodują śmierć zooplanktonu i ryb oraz są silnie toksyczne dla zwierząt wyższych i ludzi [1].

Badania wykazały, że zanieczyszczenia farmaceutyczne, które są coraz częściej wykrywane w środowisku wodnym, mogą wpływać na regulację wzrostu sinic [2]. Te szeroko stosowane zarówno w medycynie jak i weterynarii substancje dostają się do zbiorników wodnych na wiele sposobów, przede wszystkim poprzez odprowadzanie wód z oczyszczalni ścieków, gdzie leki nie są wystarczająco efektywnie utylizowane. Do często używanych grup leków należą antybiotyki. Związki te mogą mieć szczególnie duży wpływ na komórki sinic, gdyż są one bakteriami [3].

Wpływ antybiotyków na sinice zależy od rodzaju i stężenia antybiotyku. Z literatury wynika, że najbardziej toksycznymi antybiotykami względem *Microcystis aeruginosa* są β-laktamy, których minimalne stężenie hamujące wzrost wynosi od 0,003 do 1,6 mg/l, natomiast trimetoprim i kwas nalidyksowy nie wykazują toksyczności względem tych mikroorganizmów. Z kolei enzymatyczne działanie penicyliny może uszkodzić ściany komórkowe sinic, a amoksylicyna zaburza fotosyntezę oraz stymuluje wytwarzanie i uwalnianie cyjanotoksyn z komórek *Microcystis aeruginosa* [4] [5].

LITERATURA

- [1] Y. Liu, Y. Guan, B. Gao, Q. Yue, Antioxidant responses and degradation of two antibiotic contaminants in *Microcystis aeruginosa*, *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 86 (2012) 23–30.
- [2] S. Costa, G.R. Quadra, H.D.O. Souza, V. Souza, J.A. Navoni, J.A. Navoni, The link between pharmaceuticals and cyanobacteria: a review regarding ecotoxicological, ecological, and sanitary aspects, (2021).
- [3] K. Miazek, B. Brozek-Pluska, Effect of phrs and pcps on microalgal growth, metabolism and microalgae-based bioremediation processes: A review, *Int. J. Mol. Sci.* 20 (2019)..
- [4] Y. Liu, B. Gao, Q. Yue, Y. Guan, Y. Wang, L. Huang, Influences of two antibiotic contaminants on the production, release and toxicity of microcystins, *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 77 (2012) 79–87.
- [5] E. Dias, M. Oliveira, D. Jones-Dias, V. Vasconcelos, E. Ferreira, V. Manageiro, M. Caniça, Assessing the antibiotic susceptibility of freshwater cyanobacteria spp., *Front. Microbiol.* 6 (2015) 1–11..

Pierwiastki Ziemi nie tak bardzo Rzadkich

Kamil Kwiatkowski¹

*¹Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,
Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej
al. Piastów 42, 71-065 Szczecin*

kamilk9812@gmail.com

Spośród wszystkich 118 pierwiastków znajdujących się w Układzie Okresowym, na wyróżnienie zdecydowanie zasługują tak zwane Pierwiastki Ziemi Rzadkich, w skład których wchodzi skand, itr oraz wszystkie lantanowce [1]. Ze względu na swoje właściwości optyczne i magnetyczne, stanowią przedmiot wielu badań naukowców na całym świecie. Badane są również – zarówno w postaci metalicznej, mieszanin jak i związków – pod kątem dalszego zastosowania w nowoczesnym przemyśle. Dotychczasowe aplikowanie związków Pierwiastków Ziemi Rzadkich umożliwiło miniaturyzację urządzeń elektrycznych i elektronicznych, a także poprawę ich właściwości, jak szybkość, wytrzymałość, czy energochłonność [1].

Co ciekawe, równocześnie do wspomnianych badań, prowadzone są również poszukiwania ekonomicznie bardziej opłacalnych zamienników o zbliżonych do nich właściwościach. Ze względu na wzajemne chemiczne podobieństwo Pierwiastków Ziemi Rzadkich, już sam etap rozdzielania ich jest problematyczny, co dodatkowo przekłada się na koszt wydobycia. Czynniki ekonomiczne może wkrótce doprowadzić do tego, że głównym źródłem pozyskiwania ich, będzie recykling urządzeń elektronicznych [1].



Rys. 1. Ksenotym – jeden z minerałów zawierających Pierwiastki Ziemi Rzadkich [2].

LITERATURA

- [1] S. Peelman, Z.H.I. Sun, J. Sietsma, Y. Yang (2016) Leaching of rare earth elements: review of past and present technologies. *Rare Earths Industry* 21: 319-334
[2] <https://www.mindat.org/photo-1017798.html> [dostęp 4.09.2021]

Biomateriały przyszłości - inżynierowany jedwab pajęczy

Daria Łada^{1,2}

¹*Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Biochemii Molekularnej,
ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk*

²*Naukowe Koło Chemików Uniwersytetu Gdańskiego*

daria.lada@vp.pl

Pająki na drodze milionów lat ewolucji nabyły zdolność do produkcji substancji o unikalnych właściwościach - jedwabnej nici, która jest zbudowana prawie wyłącznie z białek (tzw. spidroin). Niektóre gatunki potrafią wytwarzać nawet do siedmiu rodzajów jedwabiu charakteryzujących się odmiennymi właściwościami. Z tego powodu pajęcze nici mogą wykazywać zróżnicowaną wytrzymałość, rozciągliwość, czy wiązkość (energia pękania) [1].

Białka jedwabiu pajęczego mogą być użyte do produkcji lekkich i nadzwyczaj wytrzymałych inteligentnych biomateriałów. Duże nadzieje związane są z ich potencjalnym zastosowaniem w medycynie. Powstały już między innymi projekty bardzo wytrzymałych, nietoksycznych nici chirurgicznych, rozciągliwych bandaży czy opatrunków na rany. Przy zastosowaniu odpowiedniej technologii konstruować można implanty, sztuczne więzadła i ścięgna, a także trójwymiarowe rusztowania do wzrostu komórek. Tak zaawansowane aplikacje możliwe są dzięki dużej biokompatybilności i długiemu czasowi biodegradacji jedwabiu [2].

Ostatnie osiągnięcia w dziedzinie optymalizacji metod produkcji i oczyszczania spidroin pozwoliły na zwiększenie dostępności materiału i wytworzenie biomateriałów o różnej postaci morfologicznej. Biomateriały oparte na inżynierowanym jedwabiu pajęczym przyjmujące formę filmów, hydrożeli, włókien, mikrokapsulek, mikro- i nanosfer mogą mieć istotne zastosowanie nie tylko w medycynie [3]. Kolejne modyfikacje stwarzają ogromne możliwości zachęcające do dalszych badań nad eksplorowaniem ich możliwego wykorzystania.

LITERATURA

- [1] Wrzecień M, Więclaw M, Gadomska-Gajadur A (2019). Nić pajęcza jako biomateriał. Biomedycyna i zagadnienia pokrewne. Tom 1. red. Danielewska A i Wrzyszczy B. Wydawnictwo Naukowe TYGIEL sp. z o.o. s.7–16.
- [2] Florczak A, Piekos K, Kaźmierska K, Mackiewicz A, Dams-Kozłowska H (2011). Inżynierowany jedwab pajęczy: inteligentny biomateriał przyszłości. Część I. Postępy higieny i medycyny doświadczalnej. 65: 377-88.
- [3] Kaźmierska K, Florczak A, Piekos K, Mackiewicz A, Dams-Kozłowska H (2011). Inżynierowany jedwab pajęczy: inteligentny biomateriał przyszłości. Część II. Postępy Higieny i Medycyny Doświadczalnej. 65: 389-396.

„Inteligentne” hydrożele w terapii szytej na miarę

Weronika Łukaszczyk¹

¹*Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków*

weronika.lukaszczyk@student.uj.edu.pl

Kontrolowane dostarczanie leków zyskuje w ostatnim czasie coraz większe zainteresowanie. W odróżnieniu od podejścia konwencjonalnego, jego celem jest dostarczenie substancji aktywnych do konkretnych miejsc organizmu, o konkretnym czasie. Ponadto opracowany system powinien być w stanie odpowiedzieć na sygnał związany z danym stanem chorobowym, dobierając uwalnianą dawkę leku na podstawie intensywności tego sygnału. [1]

Hydrożele to trójwymiarowe, usieciowane systemy polimerowe, zdolne do absorpcji znacznych ilości wody i płynów biologicznych. „Inteligentne” hydrożele – wrażliwe na bodźce pochodzące ze środowiska - zyskały zainteresowanie jako potencjalne nośniki do celowanego dostarczania leków, pozwalające na zmniejszenie ogólnoustrojowych skutków ubocznych terapii. [2] Uwalnianie leków z „inteligentnych” nośników hydrożelowych może następować na skutek zmiany temperatury [3], pH [2], potencjału redoks [4] po dotarciu do miejsca docelowego czy też pod wpływem cząsteczek biochemicznych, których zaburzona obecność i aktywność charakteryzuje dany stan patofizjologiczny [5], [6].

Hydrożelowe systemy kontrolowanego dostarczania leków mają potencjał stać się w przyszłości jednym z ważnych elementów terapii szytych na miarę.

LITERATURA

- [1] Qiu, Y. and Park, K., 2001. Environment-sensitive hydrogels for drug delivery. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 53(3), pp.321-339.
- [2] Kasiński, A., Zielińska-Pisklak, M., Oledzka, E. and Sobczak, M., 2020. Smart Hydrogels – Synthetic Stimuli-Responsive Antitumor Drug Release Systems. *International Journal of Nanomedicine*, Volume 15, pp.4541-4572.
- [3] J Yu, Y., Cheng, Y., Tong, J., Zhang, L., Wei, Y. and Tian, M., 2021. Recent advances in thermo-sensitive hydrogels for drug delivery. *Journal of Materials Chemistry B*, 9(13), pp.2979-2992.
- [4] Curcio, M., Diaz-Gomez, L., Cirillo, G., Concheiro, A., Iemma, F. and Alvarez-Lorenzo, C., 2017. pH/redox dual-sensitive dextran nanogels for enhanced intracellular drug delivery. *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 117, pp.324-332.
- [5] Chandrawati, R., 2016. Enzyme-responsive polymer hydrogels for therapeutic delivery. *Experimental Biology and Medicine*, 241(9), pp.972-979.
- [6] Purcell, B., Lobb, D., Charati, M., Dorsey, S., Wade, R., Zellars, K., Doviak, H., Pettaway, S., Logdon, C., Shuman, J., Freels, P., Gorman III, J., Gorman, R., Spinale, F. and Burdick, J., 2014. Injectable and bioresponsive hydrogels for on-demand matrix metalloproteinase inhibition. *Nature Materials*, 13(6), pp.653-661.

Recykling chemiczny włókien syntetycznych

Agnieszka Manikowska^{1,2}

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii
80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63

²Naukowe Koło Chemików Uniwersytetu Gdańskiego

amanikowska13@gmail.com

Na przestrzeni lat obserwuje się wzrastający problem związany z ilością wytwarzanych oraz importowanych odpadów tekstylnych. Są one generowane przede wszystkim w gospodarstwach domowych (zużyte ubrania) oraz w zakładach przemysłowych (odpady poprodukcyjne i ścinki). Z tego powodu zaczęto kłaść nacisk na wtórny przerób materiałów użytkowych w celu ponownego ich wykorzystania (*recykling*), zgodnie z założeniami modelu gospodarki cyrkularnej.

Ze względu na wykorzystaną metodę, recykling dzieli się na termiczny, mechaniczny oraz chemiczny. Recykling termiczny stosowany jest najpowszechniej w celu uzyskania energii z przetwarzanych odpadów. Recykling mechaniczny służy przede wszystkim do recyklingu materiałów czystych i polega na rozczesywaniu, rozwarstwianiu lub rozdrabnianiu włókien. Z kolei *recykling chemiczny* umożliwia przetworzenie włókien o złożonej budowie chemicznej oraz wytworzenie materiałów o nowych właściwościach fizykochemicznych [1][2].

Włókna syntetyczne i sztuczne stanowią problematyczną grupę odpadów ze względu na brak jednorodności chemicznej (pozostałości rozpuszczalników, barwników oraz chłodziw, domieszkowanie), co stwarza trudności w odzysku czystych monomerów [1].

Najlepiej poznane są metody recyklingu chemicznego odpadów tekstylnych z poli(tereftalanu etylenu) (PET), do których zalicza się: hydrolizę, glikolizę, amonolizę oraz aminolizę [3].

Komunikat stanowi przegląd mechanizmów stosowanych już metod recyklingu chemicznego, a także metod o dużym potencjale na wprowadzenie w przemyśle oraz alternatywnych źródeł pozyskiwania materiałów do produkcji tekstyliów codziennego użytku.

LITERATURA

- [1] Rasińska I, Kijeński J, Osawaru O, Migdał A, Niewiadomski P (2018) Chemiczny recykling odpadów tekstylnych, I Konferencja Naukowo-Techniczna „Innowacje w przemyśle chemicznym”: monografia, Polska Izba Przemysłu Chemicznego, wyd.2: 136-150
- [2] Kikowska A, Nowak A, Różalska M (2019) [Z]użyte ubrania, Uniwersytet Wrocławski, Raport: 1-52
- [3] Dębowski M, Iuliano A, Plichta A, Kowalczyk S, Florjańczyk Z (2021) Chemical recycling of polyesters, *Polimery* 64(11-12): 764-776

Proces powstawania i dopuszczania leku do obrotu – jak wygląda w praktyce?

Brygida Mech¹

¹Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

brygida.mech@student.uj.edu.pl

Proces odkrywania nowego leku ma bardzo złożoną, wieloetapową strukturę oraz wymaga wielu procedur i regulacji prawnych. Średnio jedna na 10 000 potencjalnych cząsteczek okazuje się odpowiednim kandydatem, stąd również wysokie koszty tego procesu sięgające nawet dwa miliardy euro.

Po zidentyfikowaniu choroby i określeniu jej molekularnego mechanizmu rozpoczyna się faza screeningu. Jest to przeszukiwanie komputerowych baz danych, a skutkiem jest określenie struktury wiodącej oraz właściwości fizykochemicznych cząsteczki. Następuje także powiązanie zależności budowy cząsteczki z jej biologiczną aktywnością, czyli analiza QSAR. Warto zwrócić uwagę, że cząsteczka powinna spełniać podstawowe reguły jakimi są odpowiednia stabilność, biodostępność i rozpuszczalność, niska toksyczność i zdolność do wywołania odpowiedniego efektu biologicznego [1,2].

Kolejnym etapem jest faza testów przedklinicznych *in vitro*, co pozwala m.in. na określenie skuteczności leku. Przeprowadzane są również badania *in vivo* na zwierzętach, które umożliwiają określenie toksyczności i wpływu działania leku na organizm.

Najdłuższym etapem są badania kliniczne. Pierwsza faza obejmuje ocenę bezpieczeństwa leku, określenie minimalnej i maksymalnej dawki. Co ważne jest prowadzona na małej grupie zdrowych ochotników. W fazie drugiej ocenia się skuteczność leku, efekt terapeutyczny na niewielkiej grupie chorych. Bada się także farmakokinetykę. Kolejna faza trzecia jest prowadzona na grupie tysięcy chorych pacjentów. Ten etap pozwala na porównanie skuteczności nowego farmaceutyku z innymi lekami oraz ocenę skutków długo i krótkoterminowych.

Po ostatecznej ocenie i dopuszczeniu leku do obrotu przez Komisję Europejską następuje rejestracja, następuje jego produkcja na masową skalę oraz trafia on na apteczne półki. Co ważne następuje czwarta faza polegająca na ciągłym nadzorze nad oceną skutków długofalowych stosowania już zarejestrowanego leku [3].

LITERATURA

- [1] Pawłowski K (2009) Bioinformatyka w poszukiwaniu nowych leków, Kosmos 58: 127-132.
- [2] Vamathevan J, Clark D, Czodrowski P, et al. (2019) Applications of machine learning in drug discovery and development. *Nature Reviews Drug Discovery* 18: 463–477
- [3] Sinha S, Vohora D (2018) Drug Discovery and Development. *Pharmaceutical Medicine and Translational Clinical Research* 2: 19-32.

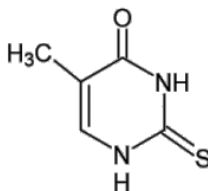
2-tiotymina jako potencjalny radiosensybilizator biologiczny

Emilia Mykowska¹, Magdalena Zdrowowicz-Żamojć¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Fizycznej
ul. Wita Stwosza 63, 80-308, Gdańsk

emilia.mykowska@gmail.com

Radiosensybilizatory są związkami uwrażliwiającymi komórki nowotworowe na cytotoksyczne działanie promieniowania jonizującego wykorzystywanego w radioterapii. Promieniowanie to charakteryzuje się wysoką energią, a produktami jego oddziaływania z cząsteczkami są reaktywne rodniki [1, 2]. Jednym z rodzajów radiosensybilizatorów są pochodne zasad nukleinowych, będące związkami akceptowanymi przez kinazy oraz polimerazy odpowiedzialne za syntezę kwasów nukleinowych [3]. Do tej grupy radiosensybilizatorów należy 2-tiotymina, która zawiera w swojej strukturze atom siarki.



Rys. 1. Struktura 2-tiotyminy.

Celem przeprowadzonych badań było sprawdzenie, czy 2-tiotymina ma potencjał, aby w przyszłości znaleźć zastosowanie jako radiosensybilizator biologiczny. W początkowym etapie pracy dokonano radiolizy roztworów wodnych 2-tiotyminy w warunkach tlenowych oraz beztlenowych. Następnie przeprowadzono analizę otrzymanych roztworów z wykorzystaniem wysokosprawnej chromatografii cieczowej oraz ultrasprawnej chromatografii cieczowej sprzężonej ze spektrometrią mas, które umożliwiły identyfikację otrzymanych produktów radiolizy.

LITERATURA

- [1] Wang H, Mu X, He H, Zhang X-D (2017) Cancer Radiosensitizers. Trends Pharmacol Sci 39(1): 24-41
- [2] Zeman E, Schreiber E, Tepper J (2014) Basics of Radiation Therapy. Abeloff's Clin Oncol 1(27): 393-422
- [3] Rak J, Chomicz L, Wiczek J, Westphal K, Zdrowowicz M, Wityk P, Żyndul M, Makurat S, Golon Ł (2015) Mechanisms of Damage to DNA Labeled with Electrophilic Nucleobases Induced by Ionizing or UV Radiation J Phys Chem 119(26): 8227-8238

Olejki eteryczne w kosmetykach

Michalina Pieper¹

¹ Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Zakład Chemometrii Środowiska, Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

michalina.pieper@op.pl

Olejki eteryczne to produkty naturalne, które mają szerokie zastosowanie w sektorze spożywczym i kosmetycznym. Stają się coraz bardziej popularne w medycynie, farmacji i kosmetologii [1].

Odgrywają istotną rolę w przemyśle kosmetycznym, ponieważ oprócz nadawania przyjemnego aromatu różnym produktom kosmetycznym mogą działać jako konserwanty i substancje aktywne, a jednocześnie są korzystne dla skóry. Co więcej, stale rosnący popyt na naturalne składniki w ogromnym stopniu przyczynił się do ponownego zainteresowania przemysłem kosmetycznym i produktami roślinnymi, zwłaszcza olejkami eterycznymi. Skłoniło to popularne firmy kosmetyczne do promowania naturalnych zapachów i wyboru minimalnie przetworzonych naturalnych składników, biorąc pod uwagę potencjalnie niekorzystne zagrożenia dla zdrowia związane ze sztucznymi substancjami zapachowymi, które są głównymi elementami kosmetyków [2]. Wśród cenionych olejków eterycznych stosowanych jako zapachy są m.in. olejki cytrusowe, lawendowe, eukaliptusowe, z drzewa herbacianego i inne olejki kwiatowe, a cenionymi składnikami zapachowymi stosowanymi w różnych kosmetykach są linalol, geraniol, limonen i cytral.

Ze względu na swoje naturalne pochodzenie są ogólnie uważane za całkowicie bezpieczne, jednak „naturalny” nie zawsze oznacza bezpieczny. Co więcej, większość olejków eterycznych jest bardzo szkodliwa dla skóry, co objawia się alergią [1].

Chociaż wiele olejków eterycznych jest ogólnie uznawanych za bezpieczne, zgłoszono szereg działań niepożądanych po ich użyciu drogą wewnętrzną lub zewnętrzną [3].

Podczas wystąpienia zostanie przedstawiona ogromna wszechstronność olejków eterycznych stosowanych w kosmetykach, a także właściwości toksykologiczne wybranych olejków.

LITERATURA

- [1] Jurowski, K., Piekoszewski, W. (2019). *Olejki eteryczne jako produkty kosmetyczne okiem toksykologa i safety assessora*
- [2] Sharmeen JB, Mahomoodally FM, Zengin G, Maggi F. (2021). *Essential Oils as Natural Sources of Fragrance Compounds for Cosmetics and Cosmeceuticals*
- [3] Vostinaru O., Codruta Heghes S., Filip L. (2020). *Safety Profile of Essential Oils*

Związki kompleksowe jako nowa generacja fotosensybilizatorów w terapii fotodynamicznej (PDT)

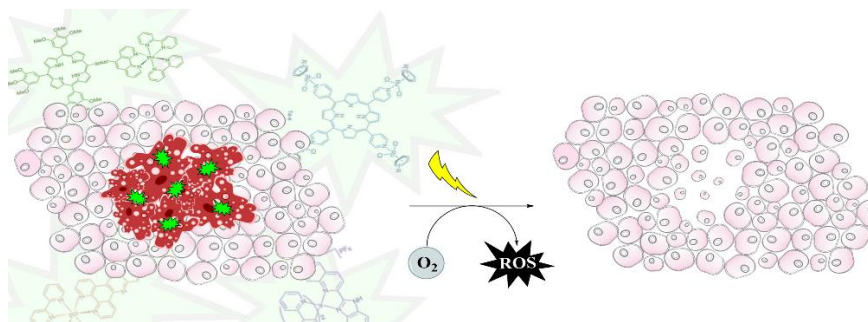
Kacper Pobłocki¹, Joanna Drzeżdżon¹, Tomasz Kostrzewa², Dagmara Jacewicz¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Technologii Środowiska, Zespół Procesów Katalitycznych, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

²Gdański Uniwersytet Medyczny, Wydział Lekarski, Katedra i Zakład Chemii Medycznej, 80-211 Gdańsk

kacperpoblocki@wp.pl

Antynowotworowa terapia fotodynamiczna (PDT) stała się alternatywnym rozwiązaniem dla standardowych, inwazyjnych metod leczenia raka, takich jak chemioterapia i radioterapia. Ta innowacyjna technika jest atrakcyjna ze względu na brak uszkodzania zdrowych komórek oraz możliwość zastosowania różnych fotosensybilizatorów (PS), które pochłaniają światło i przekształcają tlen w reaktywne formy tlenu (ROS) lub tlen singletowy ($^1\text{O}_2$). Przyczyniając się w ten sposób do apoptozy i śmierci komórek nowotworowych (Rys. 1). Zastosowanie związków koordynacyjnych w PDT ma istotny wpływ na ilość generowanych ROS, kwantową efektywność emisji (Φ_{em}) i wskaźnik fototoksyczny (PI).



Rys. 1. Schemat zastosowania terapii fotodynamicznej (PDT)

Najczęściej stosowanymi związkami koordynacyjnymi w PDT są związki na bazie rutenu(II), irydu(III), osmu(0,II), miedzi(0,I) i platyny(II).

Głównym wyzwaniem w PDT jest zsyntezowanie cząsteczek PS, które pochłaniają światło w oknie fototerapeutycznym w zakresie 600–900 nm – gdzie tkanki ludzkie są najbardziej podatne na działanie. Ważna jest również poprawa elementów związanych z wydalaniem PS z organizmu, np. kuracja Photofrin® skutkuje kilkutygodniową nadwrażliwością na światło ze względu na powolne usuwanie leku z organizmu [1].

LITERATURA

[1] Pobłocki K, Drzeżdżon J, Kostrzewa T, Jacewicz D (2021) Coordination Complexes as a New Generation Photosensitizer for Photodynamic Anticancer Therapy. *Int. J. Mol. Sci.* 22 :8052

Hordenina w suplementach diety

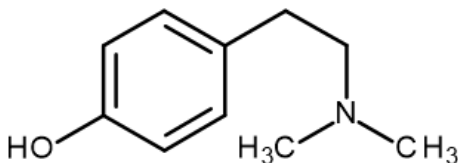
Emilia Powalka^{1,2}, Karolina Sobczak¹, Sławomira Skrzypek¹, Konrad Rudnicki¹

¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej,
Zakład Elektroanalizy i Elektrochemii, ul. Tamka 12, 91-403 Łódź

²Studenckie Koło Naukowe Chemików UŁ „Orbital”, ul. Tamka 12, 91-403 Łódź

emilia.powalka@edu.uni.lodz.pl

Hordenina (*HODE*) to naturalnie występujący związek chemiczny z grupy alkaloidów fenyletyloaminowych, o wzorze sumarycznym $C_{10}H_{15}NO$, i masie molowej 165.23 g/mol. W temperaturze pokojowej ma postać białego proszku. Jak większość alkaloidów jest słabo rozpuszczalna w wodzie, a znacznie lepiej w rozpuszczalnikach organicznych np. eterach.



Rys. 1. Wzór strukturalny hordeniny.

HODE została odkryta przez Arthura Hefftera w 1894 roku, poprzez ekstrakcję z kaktusa z gatunku *Ariocarpus fissuratus*. Występuje w wielu roślinach, między innymi w jęczmieniu, akacjach i kaktusach [1].

Hordenina znajduje zastosowanie w suplementach diety przeznaczonych dla sportowców, zgodnie z zapewnieniami producentów ma zwiększać poziom energii, redukować masę ciała, poprawiać koncentrację i wydolność fizyczną organizmu.

Przeprowadzone badania na zwierzętach udowodniły krótkotrwałe działanie hordeniny, jednak dopiero przy podaniu dużej dawki dożylnie [2]. Substancja ta powoduje przede wszystkim przyspieszenie tętna i zwiększenie ciśnienia krwi, drgawki oraz zwiększa ryzyko napadów padaczki [3].

Ze względu na fakt, iż *HODE* nie została wpisana przez Agencję ds. Żywności i Leków na listę substancji niebezpiecznych, nie posiada oficjalnej dawki leczniczej i toksycznej. Jednak z uwagi na możliwe negatywne skutki jej spożywania, stężenie *HODE* w produktach takich jak suplementy diety powinno być ściśle monitorowane.

LITERATURA

- [1] T. A. Smith (1977) Phenethylamine and related compounds in plants
- [2] H. J. Hapke, W. Strathmann (1995) Pharmacological effects of hordenine
- [3] A. Schweitzer, S. Wright (1938) Action of hordenine compounds on the central nervous system

Katelicydyna LL-37 peptyd antymikrobiotyczny o działaniu terapeutycznym

Wiktorija Rejmak¹, Adam Lesner¹, Magdalena Wysocka²

¹ Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii Katedra Technologii Środowiska, Pracownia analityki i nanodiagnostyki biochemicznej

Wita Stwosza 63,80-308 Gdańsk

² Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii Katedra Technologii Środowiska, Katedra Chemii Biomedycznej

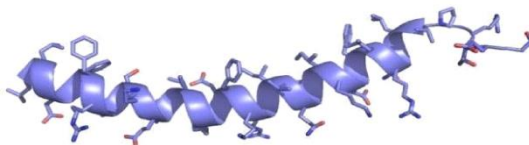
Wita Stwosza 63,80-308 Gdańsk

wiktorija.rejmak@phdstud.ug.edu.pl

Peptyd LL-37 jest jedyną katelicydyną występującą u ludzi. Wytwarzany przez neutrofile oraz komórki nabłonkowe w postaci prekursora hCAP 18. Pod wpływem enzymów przekształcany jest do LL-37 posiadającego właściwości bakteriobójcze. Badania wykazały, że jest to kationowy peptyd o liniowej α -helikalnej strukturze. Pełni on wiele funkcji ale najważniejszą z nich jest regulacja odpowiedzi immunologicznej [1].

Peptydy przeciwdrobnoustrojowe (ang. antimicrobial peptides, AMPs) są głównymi składnikami wrodzonej odporności [2]. Dodatkowo naładowane AMP oddziałują elektrostatycznie z ujemnie naładowanymi fosfolipidami występującymi w błonach komórkowych. W ten sposób powodują powstawanie przejść na błonach komórkowych. Następnie AMP są adsorbowane przez błony i następuje zmiana ich konformacji [3].

Wszystkie funkcje są ściśle związane z podwójną naturą peptydu pełniącego rolę zarówno antybiotyku jak i cząsteczki sygnalizacyjnej [2]. Ludzka katelicydyna LL-37 stanowi doskonały przykład w znaczeniu terapeutycznym ze względu na swoją liniową budowę [4].



Rys. 1. Struktura trzeciorzędowa LL-37 [5].

LITERATURA

- [1] Ulrich H.N. Dürr, U.S. Sudheendra, Ayyalusamy Ramamoorthy “LL-37, the only human member of the cathelicidin family of antimicrobial peptides”, *Biochimica et Biophysica Acta*, vol. 1758, 2006, str. 1408–1425
- [2] Wang G., Mishra B., Zhang Y., Wang F., Wang Ch., Lushnikova T., Wang X. “Design of Antimicrobial Peptides: Progress Made with Human Cathelicidin LL-37”, Department of Pathology and Microbiology, *Advances in Experimental Medicine and Biology*, vol. 1117, 2014, str. 215-240
- [3] Lei J., Sun L., Huang S., “The antimicrobial peptides and their potential clinical applications”, *Am J Transl. Res.*, vol. 11, 2019, str. 3919-3931
- [4] Agier J., Efenberger M., Brzezińska-Błaszczuk E., “Cathelicidin impact on inflammatory cells”, *Medical University of Łódź, Centr Eur J Immunol.*, vol. 40, 2015, str. 225-235
- [5] <https://www.peptideweb.com/index.php/ll-37-special-offer>, (data dostępu 12.04.2020r.)

Antyoksydanty – czy czerwone wino wydłuży nam życie?

Natalia Rutkowska^{1,2}

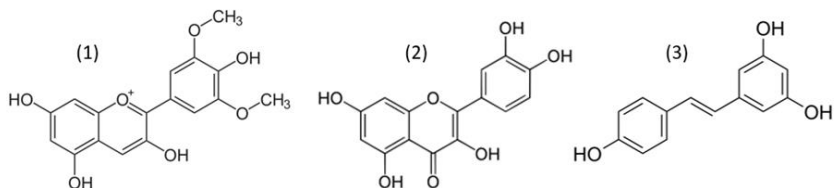
¹Studenckie Koło Biotechnologów FERMENT

²Politechnika Łódzka, Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności
ul. Wólczańska 171/173, 90-924 Łódź, Polska

nl.rutkowska@gmail.com

W 1991 roku naukowiec z Uniwersytetu Bordeaux, profesor Serge Renauld, na antenie amerykańskiej stacji CBS przedstawił swoją teorię o tzw. francuskim paradoksie. Według niego spożycie jednego kieliszka czerwonego wina dziennie miało mieć bardzo korzystny wpływ na zdrowie, czego dowodem byli rzadziej chorujący na choroby serca Francuzi. Efektem – oprócz ekspresowego wzrostu sprzedaży czerwonego wina w USA – było także zapoczątkowanie szeregu badań mających potwierdzić tę teorię.

W skład wina tradycyjnego, oprócz wody, etanolu oraz produktów ubocznych fermentacji alkoholowej, wchodzi także substancje pochodzące bezpośrednio z winorośli – są to głównie fenole i polifenole, będące antyoksydantami. Stanowią one nieenzymatyczny system obrony przeciw reaktywnym formom tlenu, które mają negatywny wpływ na organizm, wpływając m.in. na proces starzenia, choroby nowotworowe i układu nerwowego.



Rys. 1. Wzór strukturalny (1) malwidyny, (2) kwercetyny oraz (3) resweratrolu.

Najliczniejszą grupę antyoksydantów stanowią flawonoidy o bazowym szkielecie 2-fenylochromanu (Rys. 1). Wśród nich warto wyróżnić antocyjany (w tym malwidynę), które odpowiadają za czerwoną barwę wina [1]. Aktywność antyoksydacyjna flawonoidów zależy m.in. od obecności struktury katecholu (3',4'-dihydroksy) w pierścieniu B czy dodatkowych grup OH. To wyjaśnia skuteczność kwercetyny (należącej do podgrupy flawanoidów – flawanoli) i jej pochodnych glikozydowych jako antyoksydanta. Tą skuteczność wykazuje też resweratrol (3,4',5-trihydroksy-trans-stilben) – związek należący do grupy stilbenów, występujący w winogronach głównie jako izomer trans w postaci glikozydu [2]. Z powodu różnorodności i ilości substancji aktywnych zawartych w czerwonym winie, alternatywą jest testowanie zdrowotnych efektów całej frakcji fenoli [1].

LITERATURA

[1] Visioli F, Panaite SA, Tomé-Carneiro J (2020) Wine's Phenolic Compounds and Health: A Pythagorean View. *Molecules* 25(18): 4105

[2] Małyżko J, Karbarz M (2012) Substancje biologicznie aktywne w winie. *Wiadomości chemiczne* 66: 5-6

Usuwanie metali ciężkich z gleby metodą fitoekstrakcji

Anita Rzakiewicz¹

¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Biologii, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 6, 61-614 Poznań

anirza1@st.amu.edu.pl

Jedną z głównych przyczyn narastającego zanieczyszczenia środowiska naturalnego jest działalność gospodarcza człowieka. W ostatnim czasie istotną rolę odgrywa przemysł hutniczy, energetyczny, wydobywczy oraz transport, które mają ogromny wkład w dobrostan ludzi, ale jednocześnie stanowią źródło emisji związków metali ciężkich (HM), takich jak: miedź, ołów, cynk, nikiel, chrom, arsen itd. Metale ciężkie to pierwiastki o toksycznym działaniu, zdolne do migracji i kumulacji, dlatego ich obecność, chociażby w glebie, wiąże się z długotrwałym zagrożeniem dla przyrody oraz zdrowia człowieka – stosunkowo łatwo przedostają się do łańcucha pokarmowego. Problem skażenia środowiska metalami ciężkimi stał się impulsem do podjęcia wielu działań, które pozwoliłyby skutecznie obniżyć poziom stężeń metali toksycznych w glebach. Jedną z coraz częściej stosowanych metod jest fitoekstrakcja, polegająca na wykorzystaniu roślin do usuwania nagromadzonych w glebie zanieczyszczeń metalicznych bądź organicznych i ich kumulacji w możliwych do zebrania częściach nadziemnych. W procesie tym uczestniczą przede wszystkim gatunki roślin zdolne do pobierania i akumulacji wysokich stężeń metali toksycznych z jednoczesnym wytworzeniem wysokiej biomasy w określonych warunkach rolniczych – np. rośliny z rodziny *Brassicaceae*. Wykorzystanie metody fitoekstrakcji wiąże się z pewnymi zaletami, do których należą chociażby: większa efektywność i opłacalność w porównaniu do tradycyjnych metod fizyko-chemicznych, minimalna ingerencja w środowisko naturalne, czy możliwość poddania recyklingowi części roślin zawierających metale [1].

Podczas wystąpienia przybliżono możliwości zastosowania metody fitoekstrakcji w procesie oczyszczania gleb skażonych ołowiem oraz innymi metalami ciężkimi stanowiącymi zagrożenie dla środowiska. Cały proces przedstawiono z wykorzystaniem rośliny uprawnej z gatunku *Brassica juncea* L., odznaczającej się wysoką produkcją biomasy i skutecznie akumulującą ołów oraz inne pierwiastki. Charakterystyka obejmuje także biologiczne parametry akumulacji metali w korzeniach i pędach tej rośliny [1], [2].

LITERATURA

- [1] Kumar N., Duszenkow W., Motto Z., Raskin I., 1995, Phytoextraction: The Use of Plants To Remove Heavy Metals from Soils, *Environmental Science and Technology*, 29(5): 1232-8. DOI: 10.1021/es00005a014
- [2] Lai H. Y., Chen S. W., Chen Z. S., 2008, Pot Experiment to Study the Uptake of Cd and Pb by Three Indian Mustards (*Brassica Juncea*) Grown in Artificially Contaminated Soils, *International Journal of Phytoremediation*, 10(2): 89-103. DOI: 10.1080/15226510801913397

Amantadyna: synteza, właściwości oraz aktywność wobec Covid-19

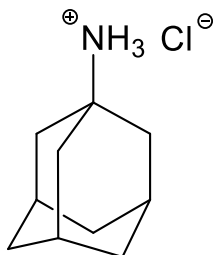
Milena Sęczkowska¹, Marcin Jasiński¹

¹Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej i Stosowanej,
ul. Tamka 12, 91-403 Łódź

e-mail: milsec445@gmail.com

Amantadyna (**1**) jest znanym lekiem przeciwwirusowym wykorzystywanym również w leczeniu choroby Parkinsona. Pod względem strukturalnym amantadyna to stosunkowo prosty związek organiczny należący do grupy amin pierwszorzędowych pochodnych adamantanu. Na ogół podawana jest w postaci odpowiedniej soli amoniowej (np. chlorowodoru), dobrze rozpuszczalnej w wodzie. Do niedawna amantadynę stosowano rutynowo w terapii grypy typu A, jednak wskutek zwiększającej się oporności szczepów tego wirusa, zastąpiono ją lekami przeciwwirusowymi o odmiennej charakterystyce (np. Oseltamiwir, Zanamiwir). Wśród innych zastosowań (**1**) warto wspomnieć zwalczanie takich chorób jak stwardnienie rozsiane i ostre zapalenie mózgu, a w ostatnim czasie amantadynę testowano również w terapii przeciw Covid-19.

W komunikacie zaprezentowane zostaną najważniejsze metody syntezy tytułowego związku oraz wyniki badań przydatności amantadyny pod kątem zastosowania w leczeniu Covid-19.



1

Rysunek 1. Struktura amantadyny (**1**).

LITERATURA

- [1] R. Araújo, J. Dolores Aranda-Martinez, G. E. Aranda-Abreu (2020) Amantadine Treatment for People with COVID-19; Arch Med Res. 51(7): 739–740
- [2] S. P. Smieszek; B. P. Przychodzen; M. H. Polymeropoulos (2020) Amantadine disrupts lysosomal gene expression: A hypothesis for COVID19 treatment. International Journal of Antimicrobial Agents, 55, 6
- [3] V. Wiwanitkit (2020) Amantadine, COVID-19 and Parkinsonism Arch Med Res. 51(7): 714

Zdrowie ukryte w czekoladzie

Dominika Skoroszevska^{1,2}

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

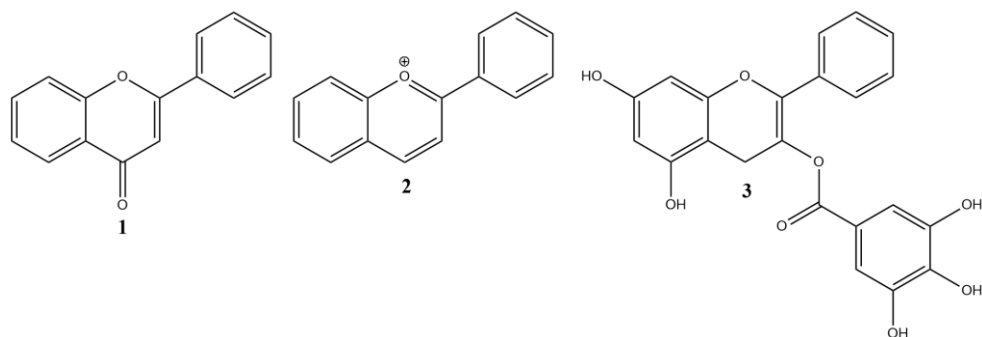
²Naukowe Koło Chemików Uniwersytetu Gdańskiego

dominika.skoroszevska@gmail.com

Większość pozytywnych efektów na organizm po spożyciu czekolady, jest związanych z występowaniem w niej flawonoidów pochodzenia roślinnego.

Flawonoidy są bioaktywnymi chemicznie związkami organicznymi, należącymi do grupy polifenoli. Występują nie tylko w kakao, ale także w herbacie, czerwonym winie oraz niektórych owocach i warzywach. Duży wpływ na zawartość flawonoidów ma pochodzenie i sposób pozyskiwania kakao, a także rodzaj czekolady. Ciemna czekolada, czyli ta z wyższą zawartością kakao, ma ich zdecydowanie więcej niż mleczna czekolada.

Przedstawicielami flawonoidów występujących w czekoladzie są katechiny, epikatechiny i antocyjanidyny.[1,2]



Rys. 1. Podstawa szkieletu flawonoidów – izoflawon (1) oraz dwa rodzaje flawonoidów – antocyjanidyna (2) i pochodna katechiny (3)

Wpływ flawonoidów na organizm zachodzi na drodze kilku mechanizmów, m.in. produkcji tlenu azotu (jego rola jest kluczowa w ochronie śródbłonna naczyń krwionośnych), działania antyoksydacyjnego, przeciwzapalnego, obniżenia poziomu lipidów oraz zmniejszenia insulinooporności.[1]

LITERATURA

[1] Zdrojewicz Z, Grześkowiak K, Łukasiewicz M (2017) Wpływ spożycia czekolady na organizm człowieka, *Borgis – Medycyna Rodzinna* 3/2017, 237-243

[2] Głodo P, Matejko B (2019) Ciemna czekolada jako bogactwo flawonoidów – sprzymierzeńców w prewencji i leczeniu wielu schorzeń, *Probl Hig Epidemiol* 100(2): 82-88

Losy leków w środowisku wodnym

Sylwia Skórkiewicz¹

¹Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

sylwia.pasionek@student.uj.edu.pl

Farmaceutyki to duża i różnorodna grupa leków; związków stosowanych do diagnozowania, leczenia, łagodzenia, leczenia lub zapobiegania chorobom u ludzi i zwierząt. W 2008 r. światowa sprzedaż farmaceutyków wyniosła 602 mld USD, przy czym liczba ta rosła rocznie o około 5-7%, równoległe ze znaczącym postępem w technologii medycznej i zwiększonymi wydatkami na opiekę zdrowotną. [1] Nieuniknioną konsekwencją tego zwiększonego zużycia środków farmaceutycznych jest wyższy poziom ich uwalniania do środowisko. Wiele farmaceutyków trafia do wody środowiska, a w ciągu ostatnich dwóch dekad jest rosnąca liczba raportów wykrywających śladowe ilości różnych leków wydawanych na receptę i bez recepty w oczyszczalniach ścieków, wodach gruntowych, a w niektórych krajach nawet wodzie pitnej. Głównymi drogami przedostania się do środowiska są leczeni pacjenci, do których farmaceutyk może przedostać się jako: związek macierzysty lub jako metabolity [2]. Ogólnie stężenia farmaceutyków wykrywanych w środowisku wodnym są stosunkowo niskie, zwykle w zakresie od ng L^{-1} do $\mu\text{g L}^{-1}$, ale w niektórych krajach (np. Indie i Chiny) stosunkowo wysokie stężenia antybiotyków i innych leków, w tym β -blokerów i przeciwdepresyjnych, które przedostają się do środowiska wodnego poprzez ścieki z zakładów obsługujących jednostki produkujące leki [3]. Co najważniejsze, środki farmaceutyczne mają na celu zmianę funkcji fizjologicznych, w przeciwieństwie do większości innych chemikaliów przedostających się do środowiska, gdzie skutki biologiczne na ogół występują jako niezamierzona konsekwencja ich podstawowej funkcji.

Przygotowany poster będzie skupiał się na omówieniu zanieczyszczenia środowiska wodnego lekami.

LITERATURA

- [1] Khetan SK, Collins TJ (2007) Human pharmaceuticals in the aquatic environment: A challenge to green chemistry. *Chem Rev* 107:2319–2364
- [2] Williams RT, Cook JC (2007) Exposure to pharmaceuticals present in the environment. *Drug Inform J* 41:133–141
- [3] Larsson DGJ (2008) Drug production facilities—an overlooked discharge source for pharmaceuticals to the environment. In: Kummerer K, ed. *Pharmaceuticals in the Environment: Sources, Date, Effects and Risks* Berlin: Springer, 37–42.

Biodruk 3D – przyszłość medycyny regeneracyjnej

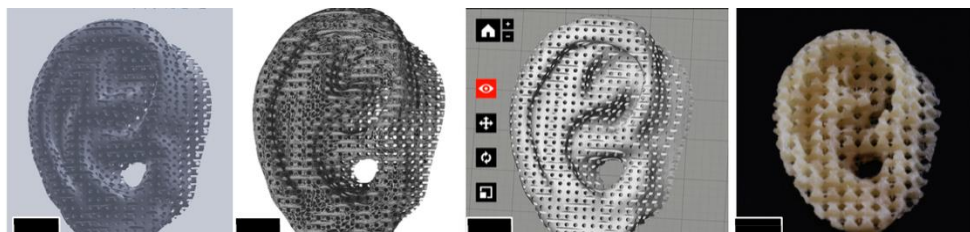
Gabriela Smaga¹

¹ Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Naukowe Koło Chemii Medycznej i Środowiskowej, Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

gabriela.smaga@student.uj.edu.pl

Technologia druku trójwymiarowego do wytwarzania materiału biologicznego – **biodruk 3D** (ang. *bioprinting*) opiera się na modelowaniu odpowiednio dobranych biomateriałów, warstwa po warstwie za pomocą drukarek 3D. Ze względu na wysoką precyzję oraz łatwą manipulację, biodruk jest intensywnie badany pod kątem wytwarzania naładowanych żywymi komórkami rusztowań w inżynierii tkankowej, której ostatecznym celem jest drukowanie narządów [1].

Idealne biomateriały, czyli naturalne lub syntetyczne substancje, które mają kontakt z systemami biologicznymi, stosowane w biotuszach powinny być zdolne do tworzenia struktur 3D o wysokiej rozdzielczości, posiadać odpowiednie właściwości fizyczne oraz charakteryzować się biodegradowalnością, dobrą biokompatybilnością i niską cytotoksycznością. Najczęściej materiały kompozytowe składają się zarówno z polimerów syntetycznych, jak i biomateriałów naturalnych (fibryna, kolagen, żelatyna, alginian) [2].



Rys. 1. Schemat procesu drukowania modelu 3D ucha [2].

Do najczęściej stosowanych technik biodruku zalicza się: **biodrukowanie atramentowe** wykorzystujące konwencjonalne procesy drukowania atramentowego, **biodrukowanie laserowe** oparte na laserze jako źródle energii do osadzania biomateriałów na podłożu oraz **biodrukowanie metodą wtłaczania** z wykorzystaniem ekstruzji mechanicznej lub termicznej [3].

LITERATURA

- [1] Yi Zhang, Piyush Kumar, Songwei Lv, Di Xiong, Hongbin Zhao, Zhiqiang Cai, Xiubo Zhao (2020) Recent advances in 3D bioprinting of vascularized tissues. *Materials and Design* 199.
- [2] Karthik Tappa, Udayabhanu Jammalamadaka (2018) Review Novel Biomaterials Used in Medical 3D Printing Techniques. *Journal of Functional Biomaterials* 9(1).
- [3] Jipeng Li, Mingjiao Chen, Xianqun Fan, Huifang Zhou (2016) Recent advances in bioprinting techniques: approaches, applications and future prospects. *Journal of Translational Medicine* 14:271.

Perowskity, czyli o rewolucji w przemyśle energetycznym

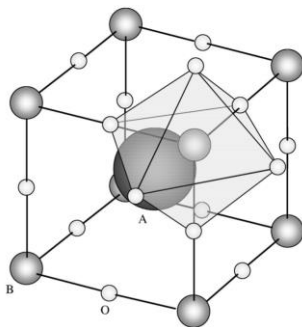
Szymon Świątek Brzeziński¹

¹Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii,
ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

szymonbrzezinski99@wp.pl

Perowskity to materiały doskonale absorbujące światło i podobnie jak krzem można wykorzystać je do przekształcania energii słonecznej w energię elektryczną. Z chemicznego punktu widzenia są one solami o ogólnym wzorze ABX_3 , co najczęściej odpowiada kationom metali i anionom tlenkowym. Omawiane związki podzielić można na te pochodzenia naturalnego, jak i wytwarzane w procesie syntezy chemicznej. Pierwszym sklasyfikowanym perowskitem był tytanian wapnia ($CaTiO_3$). Obecnie perowskitami nazywane są wszystkie związki, które posiadają taką samą strukturę krystaliczną jak wspomniana sól [1][2].

Ogniwa perowskitowe to jedno z najbardziej znaczących odkryć w nauce w fotowoltaice z ostatnich kilku lat. Generują one energię zarówno ze światła słonecznego jak i sztucznego. Kąt padania promieni słonecznych różniący się od 90 stopni nie powoduje utraty ich wydajności. Są bardzo elastyczne i lekkie co sprawia, że można je zamontować na wielu różnych powierzchniach. Zdolność pochłaniania światła przez perowskity jest lepsza zarówno od krzemu jak i arsenku galu co umożliwia znaczne zmniejszenie ilości materiału niezbędnego do wykonania ogniwa słonecznego. Sprawność konwersji omawianych ogniw w zaledwie kilka lat wzrosła do poziomu 20% i stosunkowo szybko rośnie w kierunku wyższych wartości [2][3].



Rys. 1. Struktura perowskitu (ABO_3) [1].

LITERATURA

- [1] H. Tanaka, M. Misono, Advances in designing perovskite catalysts, Current Opinion in Solid State and Materials Science, **2001**, 381-387
- [2] A. Bhalla, R. Guo I R. Roy, The perovskite structure – a review of its role in ceramic science and technology, Mat Res Innovat, **2000**, 3-26
- [3] R. Tytko, Najnowsze technologie wytwarzania ogniw fotowoltaicznych, **2020**

Reakcje [3+2] cykloaddycji – zastosowanie w syntezie organicznej

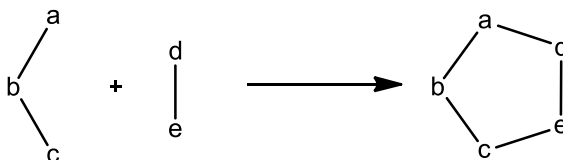
Jolanta Utnicka¹, Adrianna Wójtowicz¹, Mikołaj Sadowski¹, Karolina Kula¹

¹Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej,
C2- Katedra Chemii Organicznej; ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

jolanta.utmicka@student.pk.edu.pl

Reakcje [3+2] cykloaddycji są jedną z powszechnie stosowanych metod otrzymywania syntezy pięcioczłonowych heterocyklicznych związków organicznych, zawierających w swojej strukturze takie atomy jak: azot, fosfor, tlen czy siarkę. Związki otrzymywane na drodze tej reakcji często posiadają właściwości bioaktywne [1][2].

Reakcje te zachodzą pomiędzy dwiema cząsteczkami – 1,3-dipolem i dipolarofilem. 1,3-Dipole wnoszą do procesu cykloaddycji fragment trójatomowy. Przykładowymi związkami tego typu są azydki, ozon, związki nitrowe, związki diazowe). Z kolei, dipolarofile są to komponenty wnoszące dwa atomy do powstającego pierścienia. Do najczęściej stosowanych dipolarofili można zaliczyć olefiny oraz acetyleny [1].



Rys. 1. Ogólny schemat reakcji [3+2] cykloaddycji.

LITERATURA

[1] Koroleva EV, Bondar NF, Katok YM, Chekanov NA, Chernikhova TV, (2007) 2-Isioxazolines with an electron-acceptor substituent at C (5) in reactions with nucleophilic reagents. *Chem Heterocycl Compd* 43(3): 362-369.

[2] Jaśiński R. (2015): Reakcje 1,3-dipolarnej cykloaddycji: aspekty mechanistyczne i zastosowanie w syntezie organicznej. Radomskie Towarzystwo Naukowe (Radom).

Czy zawsze można ufać podręcznikom akademickim?

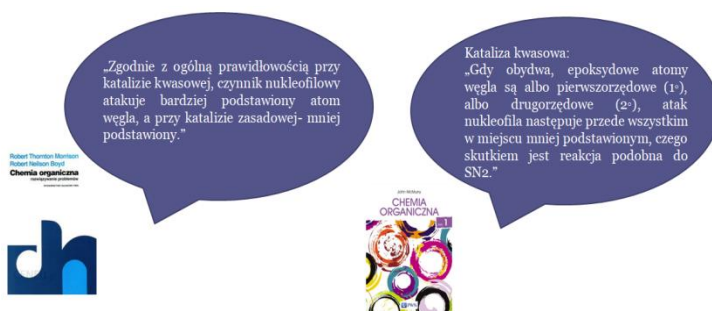
Wiktor Uzar¹, Jarosław Wilamowski¹

¹Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Zakład Chemii Organicznej
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

wiktor.uzar@student.uj.edu.pl

Od lat chemicy starają się odpowiedzieć na pytanie- jak naprawdę przebiegają reakcje chemiczne? Przez lata wypracowano różnorakie metody poznawania mechanizmów reakcji. Podczas tych badań analizujemy rozkłady ładunków w obrębie cząsteczki, przepływy elektronów i interakcje orbitalne; określamy stany przejściowe i produkty pośrednie. Mechanizm reakcji musi także bazować na ogólnie przyjętej wiedzy chemicznej co do reaktywności danych indywiduów chemicznych.

Dysponując mechanizmem jesteśmy w stanie tłumaczyć zjawiska zachodzące podczas reakcji, określić jej produkty, kontrolować samą reakcję chemiczną i kierować ją na pożądaną ścieżkę.



Rys. 1. Pozorna niezgodność informacji zawartych w podręcznikach akademickich, jako przykład ich niekonsekwencji. [1], [2]

Pomimo ciągłego doskonalenia metod badania mechanizmów reakcji w chemii organicznej i nowych informacji na ich temat, wciąż w podręcznikach akademickich można spotkać się z wiedzą przestarzałą (nawet o kilka dekad), czy po prostu z informacjami nieprawdziwymi. Czasami zdarza się także, że informacje zawarte w różnych podręcznikach wzajemnie się wykluczają.

Jaka jest skala tego zjawiska i czy można ufać podręcznikom? Na te i inne pytania postaram się odpowiedzieć podczas sympozjum, prezentując plakat z analizą przypadków zaczerpniętą z podręczników akademickich do chemii organicznej [1]-[3].

LITERATURA

- [1] R. T. Morrison, R. N. Boyd; "Chemia Organiczna"; PWN; Warszawa; 1985r.
- [2] J. McMurry; "Chemia organiczna"; PWN; Warszawa; 2017r.
- [3] J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, P. Wothers; "Chemia Organiczna" WNT; Warszawa; 2009r.

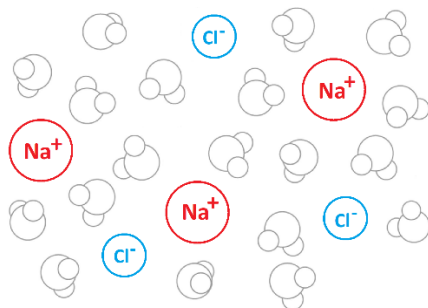
Problematiczna definicja mola

Julianna Wojdyła¹

¹Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

julianna.wojdyła@student.uj.edu.pl

Mol jest powszechnie stosowanym i niezwykle ważnym pojęciem w chemii. Masy molowe czy też stężenia, wyrażane w mol/L, pojawiają się w wielu równaniach i trudno obecnie wyobrazić sobie życie chemika bez „molowych” jednostek. Oficjalna definicja mola według IUPAC wskazuje, iż jest to podstawowa jednostka SI ilości substancji n (z ang. *unit of amount of substance*). Takie podejście sprawia, że oficjalny mol nie może być uznawany za liczbę, w przeciwnym wypadku nie mógłby być niezależną jednostką międzynarodowego systemu jednostek SI. Jednak w dalszej części tej samej definicji dowiadujemy się, iż jeden mol zawiera dokładnie $6.02214076 \times 10^{23}$ cząstek chemicznych. Pojawia się więc problem współistnienia dwóch opisów mola: jako jednostki niepoliczalnej ilości substancji oraz policzalnej liczby określonych cząstek. Rysunek 1 dobrze obrazuje poruszane zagadnienie.



Rys. 1. Ilustracja przedstawiająca 4.9816×10^{-6} attomola jonów Na^+ w wodnym roztworze chlorku sodu NaCl .

W podanym przykładzie mol musi być liczbą, gdyż odnosi się do określonych i możliwych do policzenia jonów Na^+ . W łatwy sposób można sprawdzić, że $4.9816 \times 10^{-6} \times 10^{-18} \times 6.02214076 \times 10^{23}$ wynosi 3. Występowanie tych dwóch definicji może mieć w różnych przypadkach ciekawe konsekwencje.

LITERATURA

- [1] Schmidt-Rohr K. Analysis of Two Definitions of the Mole That Are in Simultaneous Use, and Their Surprising Consequences. *J. Chem. Educ.* **2020**, 97 (3), 597–602.
- [2] Marquardt R, Meija J, Mester Z, Towns M, Weir R, Davis R, Stohner J. A Critical Review of the Proposed Definitions of Fundamental Chemical Quantities and Their Impact on Chemical Communities (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry* **2017**, 89 (7), 951–981.

Elektrokatalizatory jako klucz do zrównoważonej produkcji wodoru

Mateusz Wojtas¹

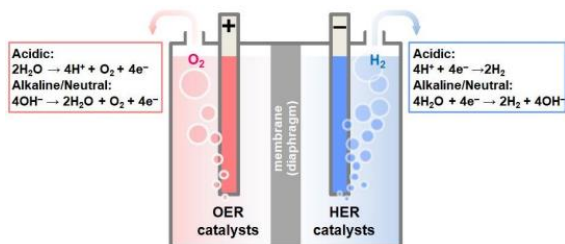
¹Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii,
Gronostajowa 2, 30-348 Kraków, Polska

mat01.wojtas@student.uj.edu.pl

Wodór otrzymany na drodze elektrolizy wody za pośrednictwem odnawialnych źródeł energii stanowi jeden z filarów dywersyfikacji i transformacji energetycznej w celu zapobiegania niekorzystnych zmian klimatycznych i ograniczenia zanieczyszczenia środowiska [1]. Choć elektroliza wody jest już znana od XVIII wieku, to powolna kinetyka i wysoka wartość nadpotencjału półkowej reakcji utleniania wody (Oxygen Evolution Reaction - OER) są przyczyną niskiej wydajności tego procesu, co utrudnia rozpowszechnienie go na szeroką skalę.

Rozwiązaniem tego problemu, które aktualnie jest szczególnie rozwijane jest elektroliza w środowisku kwaśnym z użyciem metali szlachetnych jako wysoce aktywnych elektrokatalizatorów. Jednak brak odpowiedniej stabilności oraz ich wysoki koszt nadal stanowią wyzwanie, które jest przedmiotem wielu współczesnych badań o strategicznym znaczeniu [2].

W tej pracy chciałbym przybliżyć dostępne techniki elektrolizy wody, zaprezentować główne wyzwania dotyczące zastosowania elektrokatalizatorów do OER i przedstawić stosowane techniki eksperymentalne do charakteryzacji otrzymanych związków.



Rys. 1. Schemat elektrolizy wody z opisanymi reakcjami półkowymi w kwaśnych i zasadowych warunkach. Źródło grafiki: [3].

LITERATURA

- [1] Wang, S., Lu, A. & Zhong, C.J. (2021) Hydrogen production from water electrolysis: role of catalysts. *Nano Convergence* 8, 4
- [2] Camillo Spöria, Jason Tai Hong Kwanb, Arman Bonakdarpourb, David P. Wilkinson and Peter Strasser (2016) The Stability Challenges of Oxygen Evolving Electrocatalysts: Towards a Common Fundamental Understanding and Mitigation of Catalyst Degradation. *Angew. Chem. Int. Ed.* Volume 56, Issue 22, 5994-6021
- [3] Xiao Shang, Jian-Hong Tang, Bin Dong, Yujie Sun (2020) Recent Advances of Nonprecious and Bifunctional Electrocatalysts for Overall Water Splitting. *Sustainable Energy Fuels*, Issue 7

Pirazoliny- charakterystyka, znaczenie biologiczne i metody syntezy

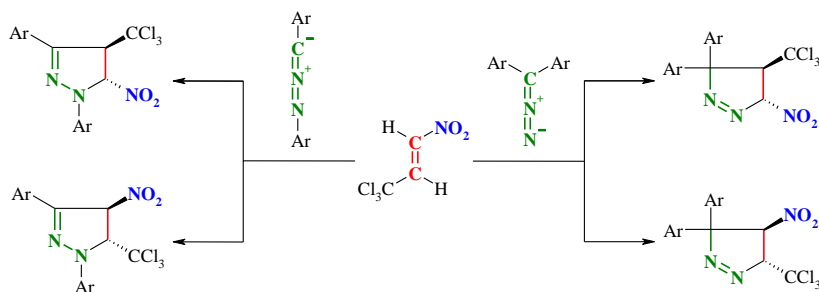
Adrianna Wójtowicz¹, Jolanta Utnicka¹, Mikołaj Sadowski¹, Karolina Kula¹

¹Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej,
C2- Zakład Chemii Organicznej
ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

adrianna.wojtowicz@student.admin.pk.edu.pl

Pirazoliny są pięciocłonowymi związkami heterocyklicznymi, zawierającymi w swojej budowie dwa sąsiadujące ze sobą atomy azotu oraz trzy atomy węgla. Związki te wykazują szeroką aktywność biologiczną. Posiadają one między innymi aktywność przeciwnowotworową poprzez hamowanie białek wrzeciona kinetycznego, działanie przeciwbakteryjną, przeciwwirusową. Trwają także badania wiążące pirazoliny w terapii choroby Parkinsona [1, 2].

Pirazoliny można otrzymać różnymi metodami. Pierwsza historycznie pirazolina została zsyntezowana podczas kondensacji α,β -nienasyconego związku karbonylowego, jakim jest aldehyd akrylowy z fenylohydrazyną. Jednakże jedną z najczęściej używanych metod syntetycznych służących do otrzymywania pirazolin jest 1,3-dipolarna cykloadycja. W zależności od stosowanych 1,3-dipoli możliwe jest otrzymanie różnych pirazolin, i tak: stosując diazowizki można otrzymać Δ^1 -pirazoliny, natomiast stosując nitryliminy w roli 1,3-dipoli możliwe jest otrzymanie Δ^2 -pirazolin [2, 3].



Rys. 1. Synteza pirazolin z zastosowanie (E)-3,3,3-trichloro-1-nitroprop-1-enu.

LITERATURA

- [1] Özdemir A, Turan-Zitouni G, Kaplancikli Z A (2008) Novel Analogues of 2-Pyrazoline: Synthesis, Characterization, and Antimycobacterial Evaluation. *Turk J Chem* 32: 529-538.
- [2] Wang Y, Rivera Vera C, Lin Q. (2007) Convenient Synthesis of Highly Functionalized Pyrazolines via Mild, Photoactivated 1,3-Dipolar Cycloaddition. *Org Lett*, 9(21): 4155-4158.
- [3] Liu H, Jia H, Wang B, Xiao Y, Guo, H. (2017) Synthesis of Spirobidihydropyrazole through Double 1,3-Dipolar Cycloaddition of Nitrilimines with Allenoates. *Org Lett* 19(18): 4714-4717.
- [4] Kula K, Dobosz J, Jasiński R, Kącka-Zych A, Łapczuk-Krygier A, Mirosław B, Demchuk O. (2020) [3+2] Cycloaddition of diaryldiazomethanes with E-3,3,3-trichloro-1-nitroprop-1-ene: experimental, theoretical and structural study. *J Mol Struct* 1203: 127473.

Tatuże – czym właściwie jest tusz pod naszą skórą?

Adela Zareba^{1,2}

¹*Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk*

²*Koło Naukowe Ochrony Środowiska UG
Naukowe Koło Chemików UG*

adelazareba@gmail.com

Tatuże od wieków są formą sztuki zdobienia ciała. Jest to modyfikacja ciała polegająca na iniekcji w skórę właściwą poprzez uszkodzenie naskórka, przebicie błony podstawnej i wprowadzeniu pigmentu barwnika. Po wstrzyknięciu barwnika w skórę, organizm naturalnie próbuje usunąć obce ciało, przez co mogą wystąpić stany zapalne. Jednakże pigment barwnika jest zbyt duży (około 0,5 mm do 4 mm) aby go usunąć, przez co barwnik pozostaje umiejscowiony w pęcherzykach w cytoplazmie w komórkach tj. fibroblasty [1].

Tusz wstrzykiwany pod skórę właściwą zawiera takie związki nieorganiczne jak: TiO_2 , BaSO_4 , Fe_3O_4 , HgS . Również w składzie barwników tuszy można znaleźć związki organiczne: związki azotowe oraz związki wielopierścieniowe. W tuszu można znaleźć jeszcze zanieczyszczenia metalami ciężkimi w szczególności w tuszach kolorowych. Metale ciężkie jakie można znaleźć w barwnikach tuszu to: antymon, chrom, kobalt, ołów a nawet rtęć. Przykładowo w tuszu żółtym można znaleźć śladowe ilości siarczynu kadmu a w tuszu czerwonym soli rtęci. W tuszu czarnym natomiast można napotkać się na węglowodory oraz nanocząsteczki węgla [2].

Działanie tatuży na zdrowie człowieka jest coraz częściej punktem zainteresowania przez naukowców. Niektóre ze składników barwników mogą być szkodliwe dla gospodarki hormonalnej a nawet być rakotwórcze.

LITERATURA

[1]Hogsberg T., Loeschner K., Löf D. et al. (2011) Tattoo inks in general usage contain nanoparticles. *Br J Dermatol* 165 (6), 1210-1218

[2]Dembska A., Rogala D., Spychała A., Hajok I., Piekut A. (2017) Zawartość metali ciężkich w tuszach od tatużu – ryzyko dla zdrowia. *Medycyna Ogólna i Nauki o Zdrowiu*, 23 (3), 210-214

Czy ściany mogą produkować prąd? Kilka słów na temat modułów BIPV oraz konwerterów spektralnych.

Patrycja Zdeb¹

¹Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

patrycjazdeb98@gmail.com

W obliczu postępującego kryzysu klimatycznego, ludzkość zmuszona jest pozyskiwać energię ze źródeł alternatywnych dla paliw kopalnianych. Jednym z nich jest promieniowanie słoneczne, przekształcane przez ogniwa fotowoltaiczne na energię elektryczną. Ponieważ proces ten jest względnie efektywny, rynek fotowoltaiki rozwija się bardzo prężnie, o czym świadczy rosnąca liczba instalacji fotowoltaicznych na terenie Polski.

Coraz większą popularność zyskują przede wszystkim moduły BIPV (ang. building integrated photovoltaics), stanowiące elementy konstrukcyjne budynków, zintegrowane z ogniwami słonecznymi. Dzięki takim rozwiązaniom, budynek jest w stanie samodzielnie pokryć swoje zapotrzebowanie na energię, a nawet produkować jej więcej niż jest w stanie zużyć. Ponieważ, moduły BIPV zazwyczaj nie znajdują się w optymalnej pozycji, a także promieniowanie które do nich dociera jest rozproszone ze względu na sąsiedztwo innych budowli oraz drzew, zachodzi konieczność stosowania rozwiązań mogących zwiększyć efektywność pracy tych ogniwa. W tym celu stosuje się tak zwane konwertery widmowe, czyli materiały zdolne do absorpcji promieniowania elektromagnetycznego w określonym zakresie i emisji fali elektromagnetycznej o odpowiednio większej lub mniejszej energii. Mechanizm działania tego typu związków opiera się głównie na up- lub down-konwersji. Warstwy wykonane z konwerterów spektralnych mogą pokrywać panele słoneczne, dzięki czemu dociera do nich więcej promieniowania, które może być przez nie pochłaniane.

Innym rozwiązaniem pozwalającym na zwiększenie wydajności pracy modułów BIPV są urządzenia nazywane koncentratorami luminescencyjnymi (LSC, ang. Luminescent Solar Concentrator). Ich rola opiera się na przechwytywaniu promieniowania słonecznego z dużej powierzchni i emitowania bardziej skoncentrowanej wiązki w stronę ogniwa fotowoltaicznego.

Oba przedstawione rozwiązania znajdują potencjalne zastosowanie zarówno w przypadku ogniw krzemowych jak i tych na bazie perowskitów lub barwników.

LITERATURA

- [1] B. Derski, „Moc fotowoltaiki w Polsce przekroczyła 3 GW”. Wysokie Napięcie, <https://wysokienapiecie.pl/33493-moc-fotowoltaiki-w-polsce-przekroczyła-3-gw/>. Dostęp: 4 listopada 2020.
- [2] R. A.S. Ferreira, S. F.H. Correia, A. Monguzzi, X. Liu, F. Meinardi, Spectral converters for photovoltaics – What’s ahead , Materials Today, 2019.
- [3] Li, G., Xuan, Q., Akram, M., Golizadeh Akhlaghi, Y., Liu, H. and Shittu, S., 2020. Building integrated solar concentrating systems: A review. Applied Energy, 260, p.114288.
- [4] M.Sibiński, K. Znajdek, Przyrządy i instalacje fotowoltaiczne, Wydawnictwo Naukowe PWN, 2016

NAGRODZONE WYSTĄPIENIA

Organizatorzy nagrodzili łącznie cztery najlepsze wystąpienia w kategoriach: komunikaty ustne i posterowe z badań własnych oraz badań przeglądowych o charakterze popularnonaukowym. Nagrodę główną zdobyli:

Pani Nina Tarnowicz – Staniak z Politechniki Wrocławskiej, za najlepszy komunikat ustny z badań własnych pt. „Catalysis of the Z-E isomerization of azobenzene by gold nanorods”

Pani Aleksandra Myślak z Politechniki Gdańskiej, za najlepszy komunikat posterowy z badań własnych pt. „Hybrydowe opatrunki na trudno gojące się rany”.

Pan Przemysław Jarosiński z Politechniki Warszawskiej za najlepszy komunikat ustny z badań przeglądowych pt. „Kompatybilność rop naftowych – a komu to potrzebne?”

Pani Weronika Łukaszczyk z Uniwersytetu Jagiellońskiego za najlepszy komunikat posterowy z badań przeglądowych pt. „”Inteligentne” hydrożele w terapii szytej na miarę”.