



EuChemS
European Chemical Society

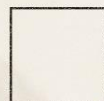


**POLITECHNIKA
BYDGOSKA**
Wydział Technologii
i Inżynierii Chemicznej

BYDGOSZCZ

68. ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO

**14-18 WRZEŚNIA
2026**



**POLITECHNIKA
BYDGOSKA**



**UNIWERSYTET
MIKOŁAJA KOPERNIKA
W TORUNIU**
Collegium Medicum
Im. Ludwika Rydygiera w Bydgoszczy



**Uniwersytet
Kazimierza
Wielkiego
w Bydgoszczy**

Książka abstraktów została przygotowana na podstawie materiałów nadesłanych przez uczestników 68. Zjazdu Naukowego PTChem.
Organizatorzy nie ponoszą odpowiedzialności za ich treść.

Opracowanie redakcyjne:

Przemysław Kosobucki
Mariusz Sulewski

Projekt okładki:

Kamil Skałeczki

Bydgoszcz 2026

Szanowni Państwo.

Członkowie i Sympatycy Polskiego Towarzystwa Chemicznego,

Z ogromną radością i zaszczytem witamy Państwa na 68. Zjeździe Naukowym Polskiego Towarzystwa Chemicznego, który w tym roku odbywa się w gościnnej Bydgoszczy — mieście o bogatej tradycji akademickiej i dynamicznie rozwijającym się środowisku naukowym.

Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego od dziesięcioleci stanowi jedno z najważniejszych wydarzeń w kalendarzu polskiej chemii. To przestrzeń spotkania wybitnych badaczy, młodych naukowców, doktorantów i studentów, a także przedstawicieli przemysłu i instytucji współpracujących z nauką. Wspólna wymiana doświadczeń, prezentacja najnowszych osiągnięć badawczych oraz dyskusje nad kierunkami rozwoju współczesnej chemii tworzą fundament postępu, który wykracza daleko poza mury laboratoriów. Tegoroczny, 68. Zjazd, jest okazją do refleksji nad rolą chemii w obliczu globalnych wyzwań XXI wieku — transformacji energetycznej, zrównoważonego rozwoju, ochrony środowiska, nowych materiałów oraz innowacyjnych technologii medycznych.

Chemia pozostaje nauką kluczową, łączącą dyscypliny i inspirującą rozwiązania, które realnie wpływają na jakość życia społeczeństwa. Wierzimy, że program naukowy Zjazdu — obejmujący wykłady plenarne, sesje tematyczne, komunikaty ustne oraz prezentacje plakatu — stworzy przestrzeń do twórczej debaty, nawiązywania współpracy oraz inicjowania nowych projektów badawczych. Mamy nadzieję na liczny udział młodych badaczy, których energia, odwaga i świeże spojrzenie wyznaczą przyszłość polskiej chemii.

Życzymy Państwu inspirujących obrad, owocnych dyskusji, nowych kontaktów naukowych oraz satysfakcji z uczestnictwa w tym wyjątkowym spotkaniu środowiska chemicznego. Niech 68. Zjazd Naukowy Polskiego Towarzystwa Chemicznego w Bydgoszczy będzie czasem twórczej wymiany myśli, budowania mostów między pokoleniami i dyscyplinami oraz umacniania wspólnoty, jaką tworzy polska chemia.

Przewodniczący Komitetu Organizacyjnego

prof. dr hab. Przemysław Kosobucki

Patronat Honorowy

KPRP

Patronat
Kancelarii
Prezydenta RP



WOJEWODA
KUJAWSKO-POMORSKI
MICHAŁ SZTYBEL



Marszałek Województwa
Kujawsko-Pomorskiego
Piotr Całbecki



PATRONAT HONOROWY
PREZYDENTA BYDGOSZCZY
Rafała Bruskiego

Komitet Honorowy

prof. dr hab. Robert Pietrzak – Prezes PTChem

prof. dr hab. Izabela Nowak – Prezes PTChem w latach 2019-2024

prof. dr hab. inż. Jerzy Błażejowski – Prezes PTChem w latach 2016-2018

prof. dr hab. Bogusław Buszewski – Prezes PTChem w latach 2010-2015

prof. dr hab. inż. Paweł Kafarski – Prezes PTChem w latach 2005-2009

prof. dr hab. Zbigniew Galus – Prezes Honorowy PTChem

Michał Sztybel – Wojewoda Kujawsko – Pomorski

Piotr Calbecki – Marszałek Województwa Kujawsko-Pomorskiego

Rafał Bruski – Prezydent miasta Bydgoszczy

prof. dr hab. inż. Marek Adamski – Rektor Politechniki Bydgoskiej

Komitet Naukowy

Przewodniczący:

prof. dr hab. inż. Jolanta Tomaszewska (PBŚ Bydgoszcz)
dr hab. inż. Joanna Paciorek-Sadowska, prof. UKW (UKW Bydgoszcz)
dr hab. Marek Foksiński, prof. UMK (CM UMK Bydgoszcz)

Członkowie:

prof. dr hab. inż. Agnieszka Adamczyk-Woźniak (PW Warszawa)
dr hab. inż. Jakub Adamek, prof. PŚ (PŚ Gliwice)
dr hab. Magdalena Barwiołek, prof. UMK (UMK Toruń)
dr hab. Paweł Bernard, prof. UJ (UJ Kraków)
prof. dr hab. Barbara Bojko (CM UMK Bydgoszcz)
dr hab. inż. Marek Brzeziński, prof. CBMiM PAN (Łódź)
prof. dr hab. Michał Ciborowski (UMB Białystok)
prof. dr hab. Józef Drabowicz (UJD Częstochowa)
prof. dr hab. Marzena Dzida (UŚ Katowice)
prof. dr hab. Marcin Hoffmann (UAM Poznań)
dr hab. Dagmara Jacewicz, prof. UG (PG Gdańsk)
dr hab. Aneta Jezierska, prof. UW r (UWr)
dr hab. inż. Beata Jędrzejewska, prof. PBŚ (PBŚ Bydgoszcz)
prof. dr hab. inż. Janina Kabatc-Borc (PBŚ Bydgoszcz)
prof. dr hab. inż. Beata Kolesińska (PŁ)
dr inż. Maria Kowalska (PBŚ Bydgoszcz)
dr hab. Violetta Kozik, prof. UŚ (UŚ Katowice)

prof. dr hab. Rafał Latajka (PW_r Wrocław)

prof. dr hab. Artur Michalak (UJ Kraków)

prof. dr hab. Krzysztof Miecznikowski (UW Warszawa)

dr hab. inż. Justyna Miłek, prof. PBŚ (PBŚ Bydgoszcz)

dr inż. Izabela Narloch (PBŚ Bydgoszcz)

prof. dr hab. Agnieszka Nosal-Wiercińska (UMCS Lublin)

dr hab. Piotr Nowicki, prof. UAM (UAM Poznań)

dr hab. inż. Rafał Oliwa, prof. PRz (PRz Rzeszów)

prof. dr hab. inż. Tomasz Olszewski, (PW_r Wrocław)

mgr inż. Alicja Pawlak (UMCS Lublin)

prof. dr hab. Robert Pietrzak (UAM Poznań)

dr hab. inż. Agnieszka Pladzyk, prof. PG (PG Gdańsk)

prof. dr hab. Beata Podkościelna (UMCS Lublin)

dr hab. Anna Poliwoda, prof. UO (UO Opole)

dr hab. Paweł Rodziewicz, prof. UJK (UJK Kielce)

dr hab. Konrad Rudnicki (UŁ Łódź)

dr hab. Dorota Rutkowska-Żbik, prof. IKiFP (IKiFP PAN Kraków)

prof. dr hab. Sławomira Skrzypek (UŁ Łódź)

prof. dr hab. inż. Małgorzata Szynkowska-Jóźwik (PŁ Łódź)

dr inż. Magdalena Warczak (PBŚ Bydgoszcz)

dr inż. Grażyna Wejnerowska, prof. PBŚ (PBŚ Bydgoszcz)

prof. dr hab. Małgorzata Wiśniewska (UMCS Lublin)

dr hab. inż. Katarzyna Witt - Kalicińska, prof. PBŚ (PBŚ Bydgoszcz)

dr hab. Elwira K. Wróblewska, prof. ZUT (ZUT Szczecin)

Komitet Organizacyjny

Przewodniczący:

prof. dr hab. Przemysław Kosobucki (PBŚ)

Członkowie:

dr hab. inż. Katarzyna Witt-Kalicińska, prof. PBŚ (zakwaterowanie)

dr Krzysztof Goryński (PBŚ), dr inż. Magdalena Warczak (PBŚ) - firmy, wystawa

dr inż. Waldemar Studziński (PBŚ), mgr inż. Marek Isbrandt (UKW) - sale, postery

dr inż. Izabela Narloch (PBŚ) - Forum Młodych

dr inż. Alicja Gackowska (PBŚ) - imprezy towarzyszące

dr inż. Mariusz Sulewski (PBŚ) - strona www

dr Joanna Drzeżdżon (UG) - wsparcie informatyczne

dr hab. inż. Beata Jędrzejewska, prof. PBŚ - 75-lecie PBŚ

dr inż. Grażyna Gozdecka, prof. PBŚ - 75-lecie PBŚ

oraz:

*dr inż. Alicja Balcerak-Woźniak, mgr inż. Małgorzata Bąk, mgr inż. Katarzyna Belka,
mgr inż. Monika Dzwonkowska-Zarzycka, inż. Patrycja Gensikowska,
dr Sylwia Grabska-Zielińska, mgr inż. Izabela Grela, mgr inż. Karolina Jelonkiewicz,
inż. Marta Kotarska, dr inż. Joanna Kowalik, dr inż. Sylwia Kwiatkowska-Skrobisz,
mgr inż. Anna Lewandowska, mgr Beata Myśliwiec, mgr Iryna Shyychuk,
mgr inż. Magdalena Tworek, dr inż. Sławomir Wilczewski, dr inż. Anna Zalewska*

Spis Sekcji Naukowych

S01 Chemia organiczna i supramolekularna

prof. dr hab. inż. Janina Kabatc-Borcz (PBŚ Bydgoszcz)
prof. dr hab. inż. Beata Kolesińska (PŁ Łódź)

S02 Chemia nieorganiczna, koordynacyjna i kataliza

dr hab. inż. Katarzyna Witt-Kalicińska, prof. PBŚ (PBŚ Bydgoszcz)
dr hab. inż. Agnieszka Pladzyk, prof. PG (PG Gdańsk)

S03 Chemia biologiczna i medyczna (PTMet)

prof. dr hab. Barbara Bojko (CM UMK Bydgoszcz)
prof. dr hab. Michał Ciborowski (UMB Białystok)

S04 Materiały funkcjonalne i fizykochemia powierzchni

dr hab. inż. Joanna Paciorek-Sadowska, prof. UKW (UKW Bydgoszcz)
prof. dr hab. Małgorzata Wiśniewska (UMCS Lublin)

S05 Chemia fizyczna i termodynamika

dr hab. inż. Beata Jędrzejewska, prof. PBŚ (PBŚ Bydgoszcz)
prof. dr hab. Marzena Dzida, UŚ (UŚ Katowice)

S06 Chemia analityczna i zielone technologie

dr inż. Grażyna Wejnerowska, prof. PBŚ (PBŚ Bydgoszcz)
prof. dr hab. inż. Małgorzata I. Szynkowska-Jóźwik (PŁ Łódź)

S07 Chemia teoretyczna i obliczeniowa

prof. dr hab. Marcin Hoffmann (UAM Poznań)
dr hab. Aneta Jezierska, prof. UW r (UW r)

S08 Dydaktyka i historia chemii

dr inż. Maria Kowalska (PBŚ Bydgoszcz)
dr hab. Paweł Bernard, prof. UJ (UJ Kraków)

S09 Elektrochemia i elektroanaliza

dr inż. Magdalena Warczak (PBŚ Bydgoszcz)
dr hab. Konrad Rudnicki (UŁ Łódź)

S10 Sekcja Młodych

dr inż. Izabela Narloch (PBŚ Bydgoszcz)
dr hab. Dagmara Jacewicz, prof. UG (UG Gdańsk)
mgr inż. Alicja Pawlak (UMCS Lublin)

Zaproszeni goście



prof. Janusz Pawliszyn
Department of Chemistry
University of Waterloo
Waterloo, Ontario, Canada

The primary focus of Professor Pawliszyn's research program is the design of highly automated and integrated instrumentation for isolating analytes from complex matrices and the subsequent separation, identification, and determination of these species. The primary separation tools used by his group are Gas Chromatography, Liquid Chromatography, and Capillary Electrophoresis coupled to a variety of detection systems, including a range of mass spectrometry techniques as well as ambient ionization techniques. Currently, his research is focusing on the elimination of organic solvents from the sample preparation step and miniaturization of the sampling devices to facilitate on-site monitoring and in-vivo analysis. Several alternative techniques to solvent extraction are investigated including the use of coated fibers, packed needles, membranes, and supercritical fluids. Dr. Pawliszyn is exploring the application of computational and modeling techniques to enhance sample preparation, chromatographic separations, and detection performance. The major area of his interest involves the development and application of imaging detection techniques for microcolumn chromatography, capillary electrophoresis, and microchip separation devices.

Professor Pawliszyn has supervised 65 PhD and 70 MS students, and he is an author of over 750 scientific publications and a book on Solid Phase Microextraction. His Hirsch Index (H-index) is 110. He is a Fellow of the Royal Society of Canada, Editor-in-Chief of Trends in Analytical Chemistry and Green Analytical Chemistry. He initiated a conference, "ExTech", focusing on new advances in sample preparation and disseminating new scientific developments in the area, which meets every year in a different part of the world. He received the 1995 McBryde Medal, the 1996 Tswett Medal, the 1996 Hyphenated Techniques in Chromatography Award, the 1996 Caledon Award, the Jubilee Medal 1998 from the Chromatographic Society, U.K., the 2000 Maxxam Award from Canadian Society for Chemistry, the 2000 Varian Lecture Award from Carleton University, the Alumni Achievement Award for 2000 from Southern Illinois University, the Humboldt Research Award for 2001, 2002 COLACRO Medal, 2003 Canada Research Chair, in 2006 he has been elected to the most cited chemists by ISI, in 2008 he received A.A. Benedetti-Pichler Award from Eastern Analytical Symposium, 2008 Andrzej Waksmundzki Medal from Polish Academy of Sciences, 2008 Manning Principal Award, 2010 Torbern Bergman Medal from the Swedish Chemical Society, 2010 Ontario Premier's Innovation Award, 2010 Marcel Golay Award, 2010 ACS Award in Separation Science and Technology, 2011 PittCon Dal Nogare Award, 2012 E.W.R. Steacie Award, 2013 CIC Environmental Research and Development Award, 2013 CIC LeSueur Memorial Award, 2015 Maria Skłodowska-Curie Medal from Polish Chemical Society, 2015 Halász Medal Award from the Hungarian Society for Separation Sciences, 2017 Pittsburgh Conference Analytical Chemistry Award, the 2017 Eastern Analytical Symposium Award for Outstanding Achievements in the Fields of Analytical Chemistry, 2018 ACS Award in Chromatography, 2018 North American Chemical Residue Workshop Excellence Award, 2019 Talanta Medal, 2022 Tswett-Nernst Award, 2023 CIC Medal, 2023 A.J.P Martin Medal from UK Chromatographic Society and 2023 IUPAC Analytical Chemistry Medal.

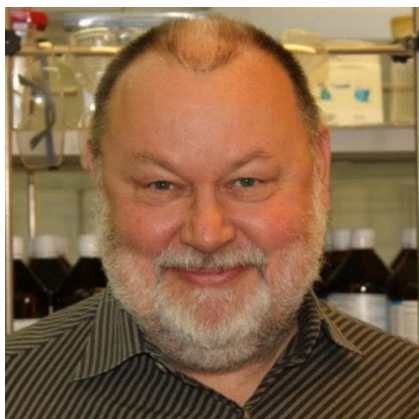


prof. dr hab. Marek Harat

*Wydział Medyczny
Politechnika Bydgoska*

Prof. Marek Harat jest światowej sławy neurochirurgiem, wybitnym naukowcem i wykładowcą akademickim. Wykonał wiele nowatorskich operacji i pionierskich zabiegów związanych m.in. z leczeniem choroby Parkinsona, zespołu obsesyjno-kompulsywnego, mózgowego porażenia dziecięcego oraz patologicznej otyłości. Na kartach historii polskiej medycyny zapisał się jako twórca współczesnej psychochirurgii. Uczestniczył także w wielu programach badawczych, kluczowych dla rozwoju neuroonkologii oraz neurochirurgii czynnościowej. Jest promotorem piętnastu rozpraw doktorskich oraz kierownikiem specjalizacji pięciu neurochirurgów. Autor wielu publikacji. Profesor Marek Harat jest również laureatem wielu nagród zarówno państwowych, uczelnianych, jak i przyznawanych przez pacjentów m.in. laureat Dziennika Bydgoskiego na Bydgoszczanina roku, odznaczony przez Ministra Obrony Narodowej Złotym Medalem „Za zasługi dla obronności kraju”. W 2018 został uhonorowany tytułem „Promotor Polski”, nadanym przez kapitułę godła „Teraz Polska”. Odznaczony „Medalem 100-lecia odzyskania niepodległości” z okazji 100-lecia odzyskania niepodległości przez Polskę, nadanym przez Prezesa Rady Ministrów. W 2019 roku został odznaczony „Srebrnym Krzyżem Zasługi” od Prezydenta Rzeczypospolitej Polskiej. W 2020 roku uzyskał tytuł „Bydgoszczanina Stulecia” z okazji 100-lecia powrotu Bydgoszczy do macierzy.

Członek Honorowy PTChem



prof. dr hab. inż. Paweł Kafarski

*Uniwersytet Warmińsko-Mazurski
w Olsztynie, Wydział Rolnictwa i Leśnictwa*

Prof. Paweł Kafarski jest wybitnym chemikiem i specjalistą w dziedzinie projektowania oraz syntezy związków biologicznie aktywnych. Ukończył Wydział Chemiczny Politechniki Wrocławskiej, z którą był związany zawodowo do 2020 roku. Obecnie jest profesorem Uniwersytetu Warmińsko-Mazurskiego w Olsztynie. Jego zainteresowania badawcze koncentrują się przede wszystkim na projektowaniu, syntezie i badaniu efektorów enzymów oraz innych receptorów komórkowych, poszukiwaniu nowych substancji wiodących dla leków przeciwnowotworowych, przeciwmalarycznych, przeciwgruźliczych czy antyosteoporotycznych, a także na opracowywaniu nowatorskich metod syntezy związków organicznych.

Dorobek naukowy prof. Kafarskiego obejmuje ponad 300 publikacji oraz 14 patentów. Jego prace były cytowane ponad 10 tysięcy razy w światowej literaturze naukowej, a indeks Hirscha wynosi 47. Wypromował 43 doktorów, z których ośmioro uzyskało tytuł profesora. Jest również doktorem honoris causa Uniwersytetu Opolskiego oraz laureatem licznych prestiżowych wyróżnień krajowych i międzynarodowych.

Medal im. Jędrzeja Śniadeckiego



prof. dr hab. inż. Kazimierz Darowicki
Politechnika Gdańska
Wydział Chemiczny

Studia wyższe ukończyłem w czerwcu 1981 roku. W roku 1991, 27 listopada uzyskałem stopień naukowy doktora. Pracę habilitacyjną obroniłem 13 grudnia 1995 r. Natomiast tytuł profesora nauk technicznych uzyskałem 12 lipca 1999 r. Od roku 2025 jestem członkiem korespondentem PAN.

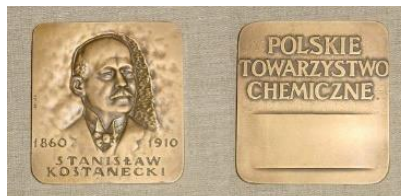
Na Wydziale Chemicznym Politechniki Gdańskiej przeszedłem kolejne szczeble rozwoju zawodowego. Na stanowisko profesora zwyczajnego zostałem powołany 2001 r. Funkcję kierownika Katedry Elektrochemii, Korozji i Inżynierii Materiałowej pełniłem od 1996 do 2023 r. Przez dwie kadencje pełniłem funkcję prezesa Polskiego Stowarzyszenia Korozyjnego. Reprezentowałem Polskę w Światowej Radzie Korozji i w Europejskiej Federacji Korozyjnej. Przez wiele kadencji pracowałem w różnych zespołach Komitetu Badań Naukowych, Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego, Narodowego Centrum Badań i Rozwoju, Narodowego Centrum Nauki i Komitetu Ewaluacji Jednostek Naukowych.

Specjalizuję w badaniach szumów elektrochemicznych, analizie harmonicznej i analizie czasowo-częstotliwościowej. Rozwijam problematykę nieliniowych pomiarów impedancyjnych i pomiarów impedancyjnych w warunkach niestacjonarnych. Podstawowym moim osiągnięciem jest opracowanie podstaw teoretycznych oraz wprowadzenie do praktyki pomiarowej Dynamicznej Elektrochemicznej Spektroskopii Impedancyjnej (DEIS). Jestem autorem lub współautorem ponad 270 publikacji skatalogowanych w bazie SCOPUS.

Moja działalność ukierunkowana na praktyczne zastosowania, ogniskuje się wokół antykorozyjnej ochrony powłokowej, ochrony elektrochemicznej oraz monitorowania i diagnostyki korozyjnej. Moim osiągnięciem jest realizacja około 500 poważnych prac badawczych dla różnych firm i koncernów, takich jak: KGHM S.A., LOTOS S.A., ORLEN S.A., Police GRUPA AZOTY S.A., Rafineria Trzebinia S.A., TAURON S.A., Elektrownia Kozienice S.A., Elektrownia Bełchatów S.A., Elektrownia Rybnik S.A., Stocznia CRIST Gdynia S.A., Stocznia Remontowa S.A., NAFTOPORT, PERN „Przyjaźń S.A.”, Kompania Budowlana, Kompania Piwowarska (Browary: Tychy, Poznań, Białystok) i wielu innych. Szereg prac badawczych wykonałem dla kontrahentów zagranicznych takich jak Alcan Ltd. (Kanada), Keramchemie GmbH. (Niemcy), K&W GmbH. (Niemcy) czy MetPro Ltd. (Irlandia).

Byłem promotorem w dwudziestu sześciu zakończonych przewodach doktorskich. Z mojej inicjatywy powstał w Politechnice Gdańskiej międzywydziałowy kierunek studiów „Inżynieria Materiałowa”. Zorganizowałem także kierunek studiów „Korozja” i współorganizowałem kierunek studiów „Technologie wodorowe i elektromobilność”. W wyniku mojego działania powstała Szkoła Doktorska Wdrożeniowa oraz Centrum Technologii Wodorowych Politechniki Gdańskiej. W ramach Centrum Morskich Technologii Militarnych PG (obecnie Centrum Technologii Bezpieczeństwa i Obronności) utworzyłem Zespół Ochrony Antykorozyjnej. Zorganizowałem studia podyplomowe „Zabezpieczenia Przeciwnikorozyjne” We współpracy z Ministerstwem Transportu, Budownictwa i Gospodarki Morskiej utworzyłem kurs specjalistyczny: „Inspektor nadzoru powłok malarskich statków morskich”. Kurs ten uzyskał aprobaty towarzystw klasyfikacyjnych Det Norske Veritas i Polskiego Rejestru Statków. We współpracy z Urzędem Dozoru Technicznego współorganizowałem kurs „Inspektor ochrony katodowej”.

Medal im. Stanisława Kostaneckiego



prof. dr hab. inż. Łukasz Berlicki
Politechnika Wrocławska
Wydział Chemiczny

Łukasz Berlicki ukończył studia magisterskie na kierunku chemia na Uniwersytecie Wrocławskim oraz na kierunku informatyka na Politechnice Wrocławskiej w roku 2000. W roku 2004 obronił pracę doktorską zrealizowaną na Wydziale Chemicznym Politechniki Wrocławskiej pod opieką prof. Pawła Kafarskiego. W latach 2009-2010 Łukasz Berlicki odbył staż naukowy na Uniwersytecie w Ratyzbonie w ramach stypendium Marie Curie Komisji Europejskiej. W roku 2012 otrzymał habilitację, a w roku 2020 tytuł profesora. Obecnie Łukasz Berlicki kieruje Katedrą Chemii Bioorganicznej na Politechnice Wrocławskiej. Jego praca naukowa dotyczy projektowania, syntezy i funkcji peptydów, peptydomimetyków oraz małych białek.

Medal im. Jana Harabaszewskiego



dr Małgorzata Krzeczowska, prof. UJ
Uniwersytet Jagielloński
Wydział Chemii

Dr Małgorzata Krzeczowska, prof. UJ, jest nauczycielką akademicką Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, związaną z Zakładem Dydaktyki Chemii UJ. Jest dydaktyczką chemii, popularyzatorką nauki, certyfikowaną tutejką naukową i rozwojową oraz autorką i współautorką publikacji naukowych, dydaktycznych i materiałów edukacyjnych. Jest absolwentką Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego. Ukończyła studia chemiczne ze specjalnością metodyka nauczania chemii, a w 1998 roku uzyskała stopień doktora nauk chemicznych w specjalności chemia analityczna i kriogenika. Pracę zawodową rozpoczęła w Zespole Kriogeniki Zakładu Chemii Nieorganicznej Wydziału Chemii UJ. Od 1999 roku swoją aktywność naukową, dydaktyczną i organizacyjną konsekwentnie rozwija w Zakładzie Dydaktyki Chemii Wydziału Chemii UJ — kolejno jako asystent, starszy wykładowca, adiunkt, a od 1 sierpnia 2025 roku profesor uczelni. Równolegle zdobywała doświadczenie szkolne jako nauczycielka chemii w VI Liceum Ogólnokształcącym w Krakowie (uzyskując nagrody Dyrektora i Kuratora).

Centralnym obszarem jej działalności jest dydaktyka chemii rozumiana jako przestrzeń łącząca wiedzę akademicką, praktykę szkolną, refleksję pedagogiczną i odpowiedzialność społeczną uczelni. W Zakładzie Dydaktyki Chemii UJ od wielu lat uczestniczy w kształceniu przyszłych nauczycieli chemii, projektuje pomoce dydaktyczne, rozwija nowoczesne formy pracy ze studentami oraz inicjuje działania wspierające popularyzację nauk przyrodniczych. Jej szczególne zainteresowania obejmują edukację formalną i nieformalną, rozwijanie umiejętności badawczych dzieci i młodzieży, ocenę jakości materiałów dydaktycznych oraz tworzenie sytuacji edukacyjnych sprzyjających samodzielnemu rozumowaniu naukowemu. W pracy ze studentami prowadziła i prowadzi zajęcia z dydaktyki chemii, dydaktyki przyrody, pomiaru dydaktycznego, podstaw chemii, chemii ogólnej i nieorganicznej dla studentów pierwszych lat, a także zajęcia „Jak studiować?” oraz „Popularyzacja nauk przyrodniczych”. Istotą jej działalności dydaktycznej jest przygotowanie studentów do świadomego i refleksyjnego nauczania chemii — nie tylko jako przekazywania treści, lecz jako projektowania doświadczeń edukacyjnych, budowania ciekawości poznawczej i wspierania uczniów w rozumieniu świata poprzez eksperyment, pytanie i obserwację. W grudniu 2024 roku została powołana na członka Zespołu Ekspertów Dydaktycznych w Ośrodku Doskonalenia Dydaktycznego Ars Docendi UJ.

Jej zaangażowanie w jakość kształcenia obejmuje również pracę organizacyjną na rzecz Wydziału Chemii UJ. Od 2013 roku pełni funkcję Pełnomocnika Dziekana ds. ewaluacji jakości procesu kształcenia. Dorobek dr Małgorzaty Krzeczowskiej, prof. UJ, wyrasta z konsekwentnego łączenia akademickiej dydaktyki chemii, doświadczenia szkolnego i popularyzacji nauki. Jej praca w Zakładzie Dydaktyki Chemii UJ ma szczególne znaczenie dla kształcenia kolejnych pokoleń nauczycieli chemii, rozwijania kultury jakości kształcenia oraz budowania relacji między uniwersytetem, szkołą i społecznym rozumieniem nauki.

Medal im. Bogusławy i Włodzimierza Trzebiatowskich



prof. dr hab. Zbigniew Hubicki

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej

Wydział Chemii

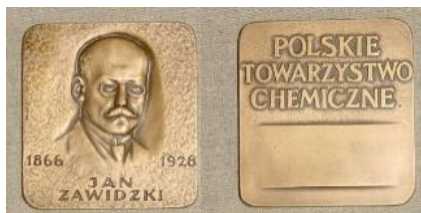
Prof. dr hab. Zbigniew Hubicki urodził się 13 maja 1946 r. w Krakowie. W 1969 r. ukończył chemię na Uniwersytecie Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, specjalizując się w chemii fizycznej. Z UMCS jest związany nieprzerwanie od 1969 r., gdzie przeszedł kolejne szczeble kariery akademickiej – od asystenta i adiunkta do profesora. Doktorat uzyskał w 1977 r., habilitację w 1990 r., a tytuł profesora w 2002 r. W latach 1998–2016 kierował Zakładem Chemii Nieorganicznej Wydziału Chemii UMCS. Jego zainteresowania obejmują chemię i technologię pierwiastków rzadkich, metody separacji związków nieorganicznych i organicznych, otrzymywanie substancji o wysokiej czystości, oczyszczanie ścieków przemysłowych oraz chemię środowiskową. Szczególne znaczenie mają badania nad wymianą jonową metali, w tym pierwiastków ziem rzadkich i metali szlachetnych. Wyniki badań znalazły zastosowanie m.in. w przemyśle chemicznym, akumulatorowym i galwanicznym. Dorobek Profesora obejmuje 221 publikacji z listy JCR, 6 książek dydaktycznych, 32 patenty i zgłoszenia patentowe oraz liczne opracowania dla przemysłu. Jego prace były cytowane ponad 7000 razy, a indeks Hirscha wynosi 37. Od 2019 r. znajduje się na liście The World's Top 2% Scientists.

Prof. Hubicki jest także cenionym dydaktykiem i wychowawcą młodych chemików. Wypromował 15 doktorów oraz około 400 magistrów i dyplomantów. Prowadził wykłady z chemii nieorganicznej dla studentów różnych specjalności. Wielokrotnie uczestniczył jako ekspert i recenzent w postępowaniach dotyczących stopni i tytułów naukowych. Zaangażowanie w pracę ze studentami znalazło wyraz w trzykrotnym wyróżnieniu dyplomem Homo Didacticus. Był również opiekunem Studenckiego Koła Naukowego „Bioaktywni”.

Pełnił funkcję prodziekana Wydziału Chemii UMCS, a w latach 2014-2025 był prodziekanem Wydziału Zamiejscowego UMCS w Puławach. Był członkiem Senatu UMCS oraz licznych komisji. Przez prawie dwie dekady działał w Radzie Naukowej Instytutu Nowych Syntezy Chemicznych w Puławach. Z jego inicjatywy powstało Ogólnopolskie Sympozjum „Nauka i Przemysł – Metody Spektroskopowe w Praktyce”, później przekształcone w międzynarodową konferencję „Science and Industry – Challenges and Opportunities”. Ważnym osiągnięciem praktycznym było współtworzenie m.in. technologii produkcji siarczanu(VI) niklu(II) dla przemysłu akumulatorowego i galwanicznego.

Za działalność naukową, dydaktyczną i organizacyjną otrzymał m.in. Medal Komisji Edukacji Narodowej, Złoty Krzyż Zasługi, nagrody Rektora UMCS oraz nagrody Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego. Został także wyróżniony nagrodą NOT II stopnia za metodę oczyszczania siarczanu niklu oraz nagrodą MNiSW II stopnia za kompleksową metodę przeróbki mączki cyrkonowej. Jego dorobek łączy badania podstawowe z zastosowaniami praktycznymi, a działalność naukowa, dydaktyczna i organizacyjna przyczyniła się do rozwoju polskiej chemii stosowanej oraz kolejnych pokoleń chemików.

Medal im. Jana Zawidzkiego



prof. dr hab. Ewa Górecka

Uniwersytet Warszawski

Wydział Chemii

Prof. Ewa Górecka (Uniwersytet Warszawski) kieruje Laboratorium Materii Miękkiej na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego. Jej zespół specjalizuje się w badaniach struktury materii miękkiej. Jest autorką lub współautorką ok. 330 publikacji naukowych, cytowanych ponad 9500 razy, HI=51 (Scopus).

Badania Ewy Góreckiej koncentrują się na samoorganizacji, chiralności i polarności układów materii miękkiej, w szczególności ciekłych kryształów. Jednym z najważniejszych osiągnięć jej zespołu było wykazanie, że złożone struktury chiralne i polarne mogą spontanicznie powstawać z cząsteczek achiralnych. Powstające układy wykazują hierarchiczne uporządkowanie na poziomie molekularnym, nanometrycznym i mezoskopowym. Do najważniejszych osiągnięć prof. Góreckiej należy identyfikacja i analiza smektycznych faz ciekłokrystalicznych, w których achiralne cząsteczki spontanicznie tworzą struktury helikalne. Układy te wykazują wielopoziomową chiralność strukturalną, a przeprowadzone badania pokazały, że chiralność może propagować się pomiędzy różnymi skalami długości – od upakowania molekularnego po mezoskopowe włókna. Drugim ważnym kierunkiem badań są ferroelektryczne ciekłe kryształy nematyczne i smektyczne, w których bardzo duża spontaniczna polaryzacja prowadzi do nietypowych zachowań fazowych oraz silnego sprzężenia pomiędzy porządkiem elektrycznym i strukturalnym. W szczególności wykazano, że rozwój uporządkowania polarnego może istotnie modyfikować, a nawet destabilizować struktury warstwowe, prowadząc do reentrantnych przejść fazowych. Wcześniejsze badania wykazały również występowanie zjawisk krytycznych związanych z przejściem pomiędzy ferroelektryczną fazą nematyczną a fazą izotropową. Kolejnym istotnym aspektem działalności naukowej prof. Góreckiej są badania nad samoorganizującymi się strukturami modulowanymi w ciekłych kryształach zbudowanych z cząsteczek o wygiętym rdzeniu (ang. bent-core liquid crystals). Układy te wykazują bogaty polimorfizm strukturalny wynikający z anizotropii kształtu cząsteczek oraz frustracji upakowania, prowadzący do złożonego uporządkowania dwu- i trójwymiarowego. Zespół prof. Góreckiej wykazał również, że takie układy ciekłokrystaliczne mogą wykazywać funkcjonalność fotoniczną, w tym spontanicznie tworzyć siatki polaryzacyjne w modulowanych fazach nematycznych. Struktury te działają jako samoorganizujące się elementy dyfrakcyjne. Odkrycia te bezpośrednio łączą zjawiska samoorganizacji materii miękkiej z fotoniką oraz właściwościami charakterystycznymi dla metamateriałów.

Całość dorobku naukowego prof. Góreckiej pokazuje, że ciekłe kryształy są aktywnymi, hierarchicznie zorganizowanymi materiałami, w których chiralność, polarność i funkcjonalność optyczna mogą spontanicznie wyłaniać się w wyniku odpowiedniego projektowania molekularnego oraz oddziaływań kolektywnych. Jej badania tworzą pomost pomiędzy fizyką miękkiej materii skondensowanej, chemią fizyczną i nowoczesnymi zastosowaniami fonicznymi.

Medal im. Ignacego Mościckiego



prof. dr hab. Andrzej Gałęski
*Centrum Badań Molekularnych
i Makromolekularnych PAN
Łódź*

Andrzej Gałęski, 1945, Profesor w Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, Łódź,

magister fizyki, 1967, Wydział Mat-Fiz-Chem Uniwersytetu Łódzkiego,

doktor nauk technicznych, 1972, Wydział Chemiczny Politechniki Łódzkiej,

doktor habilitowany nauk technicznych, 1984, Wydział Chemiczny Politechniki Łódzkiej,

profesor nauk chemicznych, Prezydent RP na wniosek Rady Naukowej CBMiM PAN

specjalność naukowa: mechanika, fizyka i fizyko-chemia materiałów polimerowych

Najbardziej istotne praktyczne osiągnięcia naukowe:

Wkład w rozwój fizyko-chemii nowoczesnych materiałów polimerowych poprzez:

- zrozumienie mechanizmów plastyczności kryształów polimerowych oraz kawitacji, co doprowadziło do uzyskania wysokowytrzymałych materiałów polimerowych poprzez kontrolowane odkształcenie plastyczne,

- ustalenie roli splątania makrocząsteczek w deformacji plastycznej polimerów krystalicznych, co skutkowało opracowaniem metod rozplątywania oraz opracowaniem nanokompozytów nowej generacji typu "all polymer" w jednym prostym procesie technologicznym,

- opracowanie materiałów łączących biodegradowalność z dobrymi właściwościami użytkowymi,

- uporządkowanie lamelarnych kryształów polimerowych w nanowarstwach, co prowadzi do materiałów o zaskakujących właściwościach fizycznych, barierowych i użytkowych, opisano w Science, 323, 757 (2009),

- na wyroby orientowane: sznurki, liny i taśmy.

- opracowanie dodatków i kompozycji politlenku metylenu o niskiej emisji formaldehydu w AZOTY-Tarnów, technologia w całości sprzedana firmie amerykańskiej Celanese.

- kompozyt polipropylenu z modyfikowaną kredą mieloną na włókna, taśmy, sznurki i tkaniny, PKN Orlen, 1994-2003, do 10 000 ton/rok, wg. pat.PL120692 i PL174956

- dodatki do stabilizacji wymiarowej politlenku metylenu, Azoty Tarnów do 10 000 ton/rok, 1999-2023

- taśmy o wytrzymałości do 450 MPa z recyklatu PET, 2013, DOZA, Bielsko-Biała oraz Makdor-Pustków

- pakiet patentów na 5 wynalazków dot. biodegradowalnych materiałów polimerowych

Upowszechnianie wiedzy:

- 296 publikacji w czasopiśmie indeksowanych, 11000 cytowań, h=54, -103 referaty na zaproszenie, -cykle wykładów dla firm przemysłowych, -16 rozdziałów w monografiach

Medal im. Wiktora Kemuli



prof. dr hab. Marek J. Potrzebowski
*Centrum Badań Molekularnych
i Makromolekularnych PAN
Łódź*

Prof. dr hab. Marek J. Potrzebowski jest twórcą unikalnej w skali kraju tematyki badawczej obejmującej rozwój metodologii i zastosowania spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) w ciele stałym w analizie strukturalnej połączeń syntetycznych i produktów pochodzenia naturalnego. Jest autorem i współautorem ponad 200 publikacji. Jego prace publikowane były w najbardziej prestiżowych czasopismach takich jak *Angewandte Chemie* czy *Journal of the American Chemical Society*.

Zainteresowania naukowe Prof. Potrzebowskiego koncentrują się wokół problemów związanych z implementacją technik wykorzystujących bardzo szybkie wirowanie próbek pod „kątem magicznym”. Opracowana metodologia jest powszechnie wykorzystywana w badaniach morfologii i polimorfizmu ciał stałych. Współtworzył strategię „NMR Crystallography”, w której spektroskopia NMR w ciele stałym, połączona z zaawansowanymi metodami obliczeniowymi pozwala precyzyjnie określić strukturę związków trudno krystalizujących.

Prowadzi prace związane z układami, które mogą służyć jako transportery molekularne; mezoporowate połączenia krzemoorganiczne z myślą o ich zastosowaniu w transporcie leków, klasyczne układy gość-gospodarz, hydro- i organożele peptydowe. Najnowsze badania dotyczą problematyki związanej z tworzeniem i analizą strukturalną kokryształów farmaceutycznych. Rozwijają koncepcje w której spektroskopia NMR w ciele stałym jest narzędziem wspierającym rozwój mechanochemii.

Nagrody Polskiego Towarzystwa Chemicznego

dr hab. Konrad Rudnicki (UŁ, Łódź)

nagroda za osiągnięcia naukowe w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne oraz w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie inżynieria chemiczna i inżynieria materiałowa będące podstawą nadania stopnia doktora habilitowanego w roku 2025

dr Beata Wyżga (UJ, Kraków)

nagroda za wyróżnioną rozprawę doktorską w dziedzinie chemii obronioną w roku 2025

mgr Aleksandra Sikora (UAM, Poznań)

nagroda za wyróżnioną pracę magisterską obronioną w roku 2025

dr hab. inż. Rafał Szabla (PWr, Wrocław)

nagroda im. Bronisława Znatowicza

mgr Hawdang Othman Abdalla (UAM, Poznań)

nagroda im. Jacka Gawrońskiego

mgr Joachim Grzybowski (UJ, Kraków)

nagroda im. Jacka Rychlewskiego

Laureaci wyróżnienia Medalem Zofii Matysikowej w roku 2026

mgr Piotr Dzwoniarek

Mazowieckie Samorządowe Centrum Doskonalenia Nauczycieli w Warszawie

mgr Bartłomiej Górski

CLXIII Liceum Ogólnokształcące im. Czesława Niemena w Warszawie

dr Tomasz Korzeniak

VI Liceum Ogólnokształcące im. Adama Mickiewicza w Krakowie

mgr Michał Turkowicz

XI Liceum Ogólnokształcące im. rtm. Witolda Pileckiego w Białymstoku

mgr Emilia Wróbel

Liceum Ogólnokształcące nr II im. Marii Skłodowskiej – Curie w Gorzowie Wielkopolskim

***Laureaci Medalu Okolicznościowego oraz Odznaki Honorowej
Polskiego Towarzystwa Chemicznego***

prof. dr hab. inż. Tomasz Olszewski (PWr, Wrocław)

prof. dr hab. Łukasz John (UWr, Wrocław)





Wykłady inauguracyjne



WI01

Facilitating sustainable analytical chemistry by miniaturization, integration and automation

Professor Janusz Pawliszyn

*Department of Chemistry
University of Waterloo, Waterloo, ON N2L 3G1*

Advances in Green Analytical Chemistry are catalyzing the emergence of miniaturized, integrated and automated devices resulting in sustainable analytical workflows that deliver high performance and throughput with minimal environmental impact. However, conventional sample preparation remains a critical bottleneck to achieve the sustainability goal, as it typically relies on exhaustive extraction approaches, in which targeted analytes are fully or close to fully removed from the sample material through laborious, solvent-intensive, and time-consuming procedures. In contrast to exhaustive extraction, many familiar analytical measurements are inherently non-exhaustive yet quantitative, such as pH detector or glucose indicator strips, which interrogate a system without depleting the analyte. Sharing the same principle, non-exhaustive partitioning enrichment—exemplified by solid-phase microextraction (SPME) approach—provides an effective alternative to multicomponent determinations by integrating sampling, extraction, cleanup, and enrichment within a single step and in addition convenient introduction to quantitation devices. The rapid evolution and diversification of microextraction methodologies illustrate how these principles enable automation and direct interfacing with advanced detection systems such as mass spectrometry and sensors, achieving high analytical efficiency with minimal solvent consumption. Together, these developments create a conceptual framework for the next generation of sustainable sample preparation methodologies, underscoring the transition of analytical chemistry toward unified, adaptive, and environmentally responsible workflows.

Zhou, W., Pawliszyn, J. Nonexhaustive microextraction as a step toward more sustainable chemical analysis in the field and the clinic. *Nat Protoc* (2026). <https://doi.org/10.1038/s41596-026-01384-4>



WI02

Perspektywy poprawy wyników leczenia glejaka wielopostaciowego jako efekt współpracy neurochirurgów i chemików

prof. dr hab. n. med. Marek Harat

*Klinika Neurochirurgii, 10 Wojskowy Szpital Kliniczny w Bydgoszczy
Wydział Medyczny Politechniki Bydgoskiej im. J.J. Śniadeckich*

Glejak wielopostaciowy jest najczęstszym pierwotnym nowotworem mózgu. Jego częstość występowania wynosi 4–6 przypadków na 100 000 osób rocznie. W ostatnich latach, ze względu na postęp w leczeniu innych nowotworów, stał się najgorzej rokującym nowotworem występującym u człowieka. Mediana przeżycia od diagnozy wynosi około 12 miesięcy dla glejaków bez metylacji promotora genu MGMT i 18 miesięcy dla pacjentów, u których występuje metylacja. Niespełna 30% pacjentów przeżywa 2 lata, a niespełna 7% – 5 lat.

Przyczyną gorszego rokowania niż w innych nowotworach jest istnienie bariery krew–mózg, która nie przepuszcza do mózgu większości leków, które tak poprawiły wyniki leczenia nowotworów na obwodzie. Drugą przyczyną złych wyników jest naciekający charakter wzrostu glejaka, co powoduje trudną identyfikację granic guza, przez co znacznie utrudnia skuteczne leczenie operacyjne i radioterapię.

Początki współpracy mojej z prof. Pawliszynem miały za cel utworzenie urządzenia łatwego do zastosowania na sali operacyjnej, które analizowałoby skład kilku metabolitów w ścianie łoży i pozwalało na szybkie wyznaczenie granic guza. Zastosowanie kwasu 5-aminolewulinowego, który ma właściwości do gromadzenia się w komórkach glejaka i zmiany zabarwienia ściany łoży guza na kolor różowy w świetle ultrafioletowym, spowodowało, że uzyskaliśmy łatwy do zastosowania i pewny sposób wyznaczania glejaka w obszarze, gdzie mózg wygląda prawidłowo, a jest nacieczony przez nowotwór. Nie przyniosło to jednak oczekiwanego przełomu w wynikach leczenia glejaka wielopostaciowego.

Pośród wielu kierunków badań bardzo obiecuje są badania nad techniką borowo-neutronową. Skuteczność tej techniki zależy od poznania różnic pomiędzy składnikami aminokwasów występujących w prawidłowym mózgu w stosunku do nowotworu. Podanie tych aminokwasów znakowanych borem ma spowodować, że zgromadzą się wyłącznie w komórkach nowotworowych. Zdziałanie na te komórki promieniowania neutronowego przy kontakcie z atomami boru ma wzbudzić promieniowanie ultrakrótkie alfa destrukcyjne dla organelli komórkowych. Powoduje to śmierć wyłącznie komórek gromadzących aminokwasy znakowane borem. Sąsiednie, zdrowe komórki układu nerwowego mają pozostać nieuszkodzone.

W ten sposób oczekujemy selektywnego niszczenia glejaka wielopostaciowego, rozrastającego się nawet w najbardziej wrażliwych obszarach mózgu. Mam Nadzieję, że da to oczepiany przełom w leczeniu glejaka wielopostaciowego.



Wykłady plenarne



WP01

Rola przypadku i zaniechań w badaniach naukowych:

Uprozczone studia na przykładzie osobistym

Paweł KAFARSKI

Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie, Wydział Rolnictwa i Leśnictwa

Plac Łódzki 4, Olsztyn

e-mail: pawel.kafarski@uwm.edu.pl, pawel.kafarski@pwr.edu.pl



Rysunek wykonany przez AI



WP02

Pomiędzy nauką, technologią i dydaktyką

Kazimierz Darowicki

Wydział Chemiczny Politechniki Gdańskiej
80-233 Gdańsk, ul G. Narutowicza 11/12;
kazimierz.darowicki@pg.edu.pl

Niestacjonarny proces deterministyczny to układ zależny od czasu, w którym przyszły stan jest jednoznacznie określony przez jego obecny stan lub ewentualnie skończoną historię stanów przeszłych. W większości przypadków procesy elektrochemiczne, a w szczególności procesy korozyjne mają naturę niestacjonarną. Są one w pełni określone teoretycznie w łącznej dziedzinie czasu i częstotliwości. Podstawową ideą analizy czasowo-częstotliwościowej jest zaprojektowanie funkcji wspólnej, która może opisywać charakterystyki sygnałów w dziedzinie czasowo-częstotliwościowej. Uzyskane transformaty czasowo-częstotliwościowe odwzorowują jednowymiarową funkcję czasu $x(t)$ na dwuwymiarową funkcję czasu i częstotliwości $x(t, f)$. Podstawowymi narzędziami matematycznymi łącznej analizy czasowo-częstotliwościowej są: dystrybucja Wignera-Ville'a (WVD), krótkoczasowa transformacja Fouriera ($STFT$) oraz transformacja falkowa (WT). Te narzędzia matematyczne wykorzystano do analizy szumów elektrochemicznych, analizy harmonicznej i dynamicznej elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej.

Światowy całkowity roczny koszt strat korozyjnych szacuje się na 2,5 biliona dolarów, co stanowi około 3,4% światowego PKB. Dane te dowodzą, że ochrona przed korozją to istotny problem z punktu widzenia gospodarki i finansów. Koszt ekonomiczny korozji to tylko część odczuwalnych strat. Koszt korozji w kontekście bezpieczeństwa publicznego i zdrowia jest jeszcze wyższy i obejmuje koszty pośrednie. Gdy skorodowane konstrukcje zawodzą – gdy zawalają się mosty, pękają rury lub pękają zbiorniki magazynowe, awariom ulegają instalacje przemysłowe. Skutki tych zdarzeń mogą być katastrofalne dla środowiska naturalnego i infrastruktury przemysłowej. Tych konsekwencji procesów korozyjnych nie można ująć w ścisłe ramy finansowe. W tym kontekście korozję należy wiązać z bezpieczeństwem technicznym, ochroną środowiska i szeroko pojętą ekologią. Prace o tym charakterze stanowią poważną część mojej działalności akademickiej, dlatego przedstawiam skrócony przegląd zrealizowanych strategicznych prac wdrożeniowych związanych z ochroną katodową, ochroną powłokową oraz monitorowaniem i diagnostyką korozyjną.

Fundamentalnym krokiem na drodze ograniczania skutków procesów korozyjnych jest dogłębna znajomość ich mechanizmów, sposobów ich wykrywania, przyczyn ich występowania i metod ochrony. W ramach swojej działalności akademickiej stworzyłem na Politechnice Gdańskiej szeroką ofertę dydaktyczną z zakresu korozji i ochrony przed korozją. Obejmuje ona utworzenie oryginalnego, niemającego odpowiednika w Polsce kierunku studiów "Korozja". Poza tym utworzyłem studia podyplomowe "Zabezpieczenia Przeciwkorozyjne" i certyfikowane kursy inspektorskie z zakresu powłok antykorozyjnych i ochrony katodowej.

Pełniejszy opis działalności naukowej, technologicznej i dydaktycznej jest przedstawiony na stronie internetowej <https://darowicki.edu.pl>



WP03

Spektroskopia Magnetycznego Rezonansu Jądrowego Ciał Stałych w Służbie Chemii Analitycznej i Strukturalnej.

Marek J. Potrzebowski

Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk, 90-363 Łódź, ul.

Sienkiewicza 112

e-mail marek.potrzebowski@cbmm.lodz.pl

Spektroskopia Magnetycznego Rezonansu Jądrowego (Nuclear Magnetic Resonance NMR) jest jedną z najbardziej uniwersalnych technik instrumentalnych umożliwiających analizę materii w każdym stanie skupienia, w fazie gazowej, ciekłej, stałej. Jest techniką, która daje wgląd w budowę produktów naturalnych, połączeń syntetycznych na poziomie pojedynczych atomów. Definiuje nie tylko ich lokalne otoczenie ale również pozwala opisać procesy dynamiczne w skali globalnej, segmentowej i punktowej. Dynamiczny rozwój NMR-owych metod spektroskopowych w fazie ciekłej nastąpił stosunkowo szybko, tuż po odkryciu zjawiska rezonansu w latach 50-tych ubiegłego wieku. Zdecydowanie więcej problemów, natury technicznej, koncepcyjnej i interpretacyjnej pojawiło się przy implementacji metod NMR w ciele stałym i przez kilka dekad technika ta czekała na swój czas.

W pierwszej części wykładu omówione będą podstawy wysokorozdzielczej spektroskopii NMR w ciele stałym, geneza techniki MAS (magic angle spinning) i strategia zwiększająca czułość pomiarów (cross polarization). Zaprezentowana będzie metodologia oparta na bardzo szybkim wirowaniu próbek pod kątem magicznym (Very Fast MAS). Możliwość rotacji próbek z szybkością przekraczającą 60 kHz jest kluczowa, szczególnie przy detekcji widm protonowych co otwiera drogę do wielo-wymiarowej (ND) spektroskopii NMR w systemie odwrotnej detekcji

Omówiona będzie koncepcja znana w literaturze jako „NMR Crystallography”, komplementarne podejście do analizy ciał stałych łączące pomiary NMR, dane uzyskane z eksperymentów dyfrakcji proszkowej (PXRD) z zaawansowanymi obliczeniami teoretycznymi (Gauge Including Atomic Orbitals- GIAO, Gauge Including Projector Augmented Wave- GIPAW) a w ostatnim okresie wspierana strategią Crystal Structure Prediction (CSP)

Na przykładzie tworzenia kokryształów farmaceutycznych i mechanosyntezy peptydów wykazane będzie jak istotnym narzędziem w rozwoju mechanochemii jest spektroskopia magnetycznego rezonansu ciał stałych. Liczne inne przykłady, pokazujące analizę procesów termicznych, przemian fazowych, dynamikę molekularną w sieciach krystalicznych dla bardzo szerokiej grupy połączeń chemicznych dopełnią obraz potwierdzający uniwersalność metody i jej znaczenie w rozwoju chemii analitycznej i strukturalnej.



WP04

Minibiałka — nieoczywiste cząsteczki do nietrywialnych zadań

Łukasz Berlicki

Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska;
Wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław;
e-mail lukasz.berlicki@pwr.edu.pl

Minibiałka wypełniają lukę pomiędzy obszarami badawczymi dotyczącymi peptydów i białek^[1]. Definiuje się je jako peptydy o masie cząsteczkowej nieprzekraczającej 10 kDa, wykazujące zarazem stabilną w roztworze strukturę trzeciorzędową. Z takiej charakterystyki wynika szereg cech, a w szczególności możliwość otrzymywania na drodze syntezy chemicznej oraz dobrze zdefiniowana, stabilna i relatywnie rozbudowana struktura trójwymiarowa. Minibiałka łączą zatem właściwości charakterystyczne dla peptydów z cechami białek globularnych, co otwiera szereg nietrywialnych możliwości aplikacyjnych, obejmujących w szczególności konstrukcja związków biologicznie czynnych oraz katalizatorów.^[2]

W trakcie wystąpienia przedstawiony zostanie proces opracowywania nowych minibiałek. Mogą one być projektowane *de novo* z wykorzystaniem metod komputerowych tj. algorytm FastDesign, zaimplementowany w pakiecie oprogramowania Rosetta.^[3] Ich stabilność konformacyjną można modulować poprzez wprowadzenie cyklicznych β -aminokwasów, wymuszających określone konformacje lokalne.^[4] Możliwe jest również konstruowanie minibiałek zawierających wnęki, znajdujące zastosowanie w katalizie.

Zaprojektowane minibiałka otrzymywane są następnie przy użyciu w pełni zautomatyzowanego przepływowego syntezyzatora peptydów w fazie stałej, opracowanego w naszym laboratorium. Monitorowanie spektrofotometryczne w zakresie UV umożliwia ocenę postępu syntezy w czasie rzeczywistym oraz automatyczną regulację kluczowych parametrów procesu. Model sztucznej inteligencji, wytrenowany na eksperymentalnych zbiorach danych, wyznacza optymalne czasy sprzęgania, co pozwala na niezawodną syntezę sekwencji liczących do 120 reszt aminokwasowych.

Otrzymane minibiałka charakteryzowane są pod kątem stabilności konformacyjnej, struktury trójwymiarowej oraz funkcji z zastosowaniem szerokiego panelu metod eksperymentalnych. Przykłady zastosowań obejmują inhibitory oddziaływań białko-białko (np. PD-1/PD-L1)^[5] oraz katalizatory enzymopodobne (hydrolazy, aldolazy).^[6] Przedstawione wyniki potwierdzają wszechstronność rusztowania minibiałkowego jako platformy do opracowywania cząsteczek funkcjonalnych.

[1] K. Ożga, Ł. Berlicki, "Design and Engineering of Miniproteins" *ACS Bio & Med Chem Au* **2022**, 2, 316–327.

[2] E. Rudzińska-Szostak, Ł. Berlicki, "Towards filling the gap between organocatalysis and biocatalysis — catalysis by folded peptides and miniproteins" *Tetrahedron Chem* **2026**, 18, 100161.

[3] M. Bejger, P. Fortuna, M. Drewniak-Świtalska, J. Plewka, W. Rypniewski, Ł. Berlicki, "A computationally designed β -amino acid-containing miniprotein" *Chemical Communications* **2021**, 57, 6015–6018.

[4] M. Drewniak-Świtalska, B. Barycza, E. Rudzińska-Szostak, P. Morawiak, Ł. Berlicki, "Constrained beta-amino acid-containing miniproteins" *Org. Biomol. Chem.* **2021**, 19, 4272–4278.

[5] A. Ciesiołkiewicz, J. Lizandra Perez, L. Skalniak, P. Noceń, Ł. Berlicki, "Miniprotein engineering for inhibition of PD-1/PD-L1 interaction" *Protein Science* **2024**, 33, e5106.

[6] K. Ożga, Ł. Berlicki, "Miniprotein-Based Artificial Retroaldolase" *ACS Catal.* **2022**, 12, 15424–15430.

Plastyczność krystalicznych tworzyw sztucznych

Andrzej Gałęski

Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych, Polska Akademia Nauk, Łódź

Większość powszechnie stosowanych polimerów ma strukturę krystaliczną z lamelami ułożonymi w stosy, pomiędzy którymi znajdują się warstwy amorficzne; oba elementy mają rozmiary rzędu nanometrów. Początkowy etap deformacji zachodzi w obszarach międzylamelarnych ze względu na ich niski moduł sprężystości [1]. Odkształcanie podczas rozciągania obejmuje wydłużanie fragmentów łańcuchów molekularnych w fazie amorficznej, czemu towarzyszy rozdzielanie lameli, ich rotacja oraz ścinanie między lamelami. W momencie osiągnięcia granicy plastyczności w wielu polimerach obserwuje się intensywny poślizg łańcuchów w kryształach. W innych krystalicznych polimerach w pobliżu lub wokół granicy plastyczności mechanicznej powstają pewne pustki o rozmiarach nanometrowych określane mianem kawitacji. Powstawanie nanopustek inicjowane jest przez pory wolnej objętości [2]. Zachodzi konkurencja pomiędzy kawitacją a aktywacją plastyczności kryształów [3]. Kawitację obserwuje się w polimerach, w których ujemne ciśnienie przy granicy plastyczności jest większe niż ciśnienie wymagane do utrzymania pustki w stanie otwartym. Ciśnienie zamykające p , wywołane napięciem powierzchniowym γ_s , jest związane z rozmiarem pustki r zależnością:

$$p = 2 \cdot \gamma_s / r$$
 Kawitacja jest więc kontrolowana przez: opór plastyczny kryształów, wytrzymałość mechaniczną materiału, napięcie powierzchniowe, grubość warstw amorficznych (L) oraz pory wolnej objętości. Wykazano, że wypełnienie porów wolnej objętości substancjami o niskiej masie cząsteczkowej tłumi kawitację [4].

Badania SAXS prowadzone podczas odkształcania wykazały, że nie występują pustki mniejsze niż L . Pora kawitacyjna powstaje nagle, w jednym etapie, a nie poprzez stopniowy wzrost [5]. Kawitacja powoduje redystrybucję naprężeń, prowadząc do nieregularnego ścinania lameli, ich pękania oraz powstawania mikroszyjek. W konsekwencji stopień krystaliczności staje się czynnikiem decydującym podczas rozciągania materiału, bardziej niż sama odporność mechaniczna kryształów.

Wynikają z tego trzy ważne wnioski:

1. w polimerach o niskiej wytrzymałości kawitacja nie występuje, natomiast w polimerach o wyższej wytrzymałości jest zjawiskiem typowym,
2. przyłożenie dodatniego ciśnienia hydrostatycznego tłumi kawitację,
3. polimery o słabiej splecionych makrocząsteczkach bardzo łatwo ulegają kawitacji [6].

Do identyfikacji mechanizmów deformacji zastosowano ściskanie w matrycy kanałowej (channel die compression), w której dodatnie ciśnienie hydrostatyczne zapobiega kawitacji. Obserwuje się wtedy różne układy poślizgów krystalograficznych, w tym poślizgi poprzeczne oraz wzdłuż łańcuchów [7]. Poślizgi te są aktywowane przez emisję dyslokacji z krawędzi kryształów. Morfologia przy wysokim stopniu ściskania przypomina teksturę monokryształu.

Odkryto również dwa nowe mechanizmy nukleacji półpętli dyslokacji krawędziowych i śrubowych z powierzchni lameli, które są niezależne od grubości lameli [8].

[1] M. Polinska, A. Rozanski, A. Galeski, J. Bojda, *Macromolecules*, 2021, 54, 9113–9123

[2] A. Pawlak, A. Galeski, *Macromolecules*, 2021, 54, 9113–9123

[3] A. Rozanski, A. Galeski, *Macromolecules*, 2011, 44, 7273–7287

[4] A. Rozanski, A. Galeski, *Int. J. Plasticity*, 2013, 41, 14–29

[5] V. Rahmanian, A. Galeski, A. Rozanski, *Macromolecules*, 2024, 57, 1337–1353

[6] J. Krajenta, A. Pawlak, A. Galeski, *J. Polym. Sci., B. Polym. Phys.* 2016, 54, 1983–1994

[7] A. Galeski, Z. Bartczak, A. S. Argon, R. E. Cohen, *Macromolecules*, 1992, 25, 5705–5718

[8] A. S. Argon, A. Galeski, T. Kazmierczak, *Polymer*, 2005, 46, 11798–11805



WP06

Complex order of new polar liquid crystal phases

Ewa Gorecka

Faculty of Chemistry, Warsaw University

The ferroelectric nematic (NF) phase, discovered in 2017, exhibits a range of remarkable properties that distinguish it from conventional nematics. The discovery of a liquid phase exhibiting long-range ordering of electric dipole moments was a major surprise, as it had been widely assumed that dipolar interactions were too weak to overcome the thermal fluctuations present in liquids. Despite its fluid nature, the NF phase exhibits spontaneous macroscopic electric polarization comparable to that found in crystalline ferroelectrics ($5\text{--}10\text{ }\mu\text{C}/\text{cm}^2$), an exceptionally high dielectric permittivity ($\sim 10,000$), and strong nonlinear optical properties. However, unlike conventional solid ferroelectrics, the optical response of the NF phase to an applied electric field is exceptionally strong, which is related to its fluid nature. In recent years, further polar nematic phases have been identified, including antiferroelectric phases and ferroelectric phases exhibiting spontaneous helical ordering.

Recent studies have further shown that polar order can strongly couple to positional order in lamellar (smectic) systems. In polar smectic phases, the interplay between spontaneous polarization, molecular tilt, and translational order can give rise to complex hierarchical structures of modulated phases, whose specific structures can be controlled through appropriate molecular design.

Złożony porządek nowych polarnych faz ciekłokrystalicznych

Odkryta w 2017 roku ferroelektryczna faza nematyczna (NF) wykazuje wiele niezwykłych właściwości, które odróżniają ją od konwencjonalnych nematyków. Odkrycie ciekłej fazy wykazującej uporządkowanie elektrycznych momentów dipolowych było dużym zaskoczeniem, ponieważ przyjmowano, że oddziaływania dipolowe są zbyt słabe, aby przewyciężyć fluktuacje termiczne występujące w cieczach. Pomimo tego, że jest to ciecz, charakteryzuje się spontaniczną makroskopową polaryzacją elektryczną, porównywalną z polaryzacją występującą w krystalicznych ferroelektrykach ($5\text{--}10\text{ }\mu\text{C}/\text{cm}^2$), bardzo dużą stałą dielektryczną (~ 10000) oraz silnymi nieliniowymi właściwościami optycznymi. Jednak w przeciwieństwie do konwencjonalnych stałych ferroelektryków odpowiedź optyczna fazy NF na przyłożone pole elektryczne jest wyjątkowo silna, co związane jest z jej ciekłowodnym charakterem. W ostatnich latach identyfikowane są kolejne modyfikacje polarnych nematyków, w tym fazy antyferroelektryczne oraz fazy ferroelektryczne wykazujące spontaniczne helikalne uporządkowanie.

Najnowsze badania pokazują ponadto, że uporządkowanie polarne może silnie sprzęgać się z uporządkowaniem pozycyjnym w układach lamelarnych (smektycznych). W polarnych fazach smektycznych spontaniczna polaryzacja, nachylenia molekuł oraz uporządkowanie translacyjne prowadzi do powstawania złożonych struktur hierarchicznych faz modulowanych, rodzaj fazy można kontrolować przez odpowiednią strukturę molekularną.



WP07

Od próbówki do umysłu. 90 lat po Harabaszewskim – co zostało z jego pomysłu na nauczyciela chemii?

Małgorzata Krzeczowska

Zakład Dydaktyki Chemii, Wydział Chemii UJ, Kraków

*adres korespondencyjny;
malgorzata.krzeczowska@uj.edu.pl*

Koncepcja Jana Harabaszewskiego traktująca chemię jako szczególną szkołę myślenia pozostaje zaskakująco aktualna także wobec wyzwań współczesnej edukacji. Zmieniają się uczniowie, technologie, dostęp do informacji i oczekiwania wobec szkoły, nie zmienia się jednak potrzeba kształcenia ludzi ciekawych świata, potrafiących zadawać pytania, weryfikować informacje, argumentować i wyciągać wnioski na podstawie dowodów.

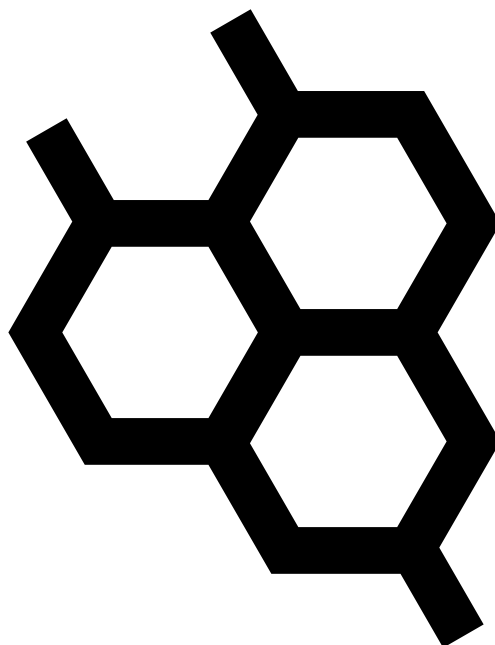
Wykład podejmie tematykę szczególnej roli edukacji chemicznej oraz sposobów przygotowywania nauczycieli do tworzenia środowiska sprzyjającego rzeczywistemu uczeniu się. Wyniki badań z zakresu dydaktyki zostaną zestawione z doświadczeniami własnej praktyki akademickiej, szkolnej i popularyzatorskiej. Szczególne miejsce zajmą eksperymenty, dociekanie naukowe, praca z błędem, aktywność ucznia i relacja nauczyciel–uczeń.

Współczesna chemia może bowiem nie tylko pomagać rozumieć materię i jej przemiany. Musi pozostawać – zgodnie z ideą Harabaszewskiego – przestrzenią służącą uczeniu się samodzielnego myślenia i odpowiedzialnego poznawania świata.



S01

Chemia organiczna i supramolekularna





Wykłady sekcyjne

Nowe sposoby funkcjonalizowania levoglukosenonu

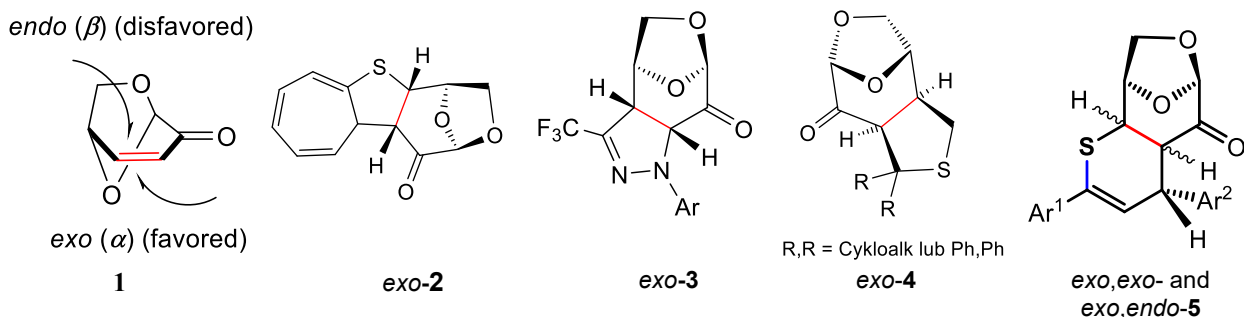
Grzegorz Młostoń,^{*,1)} Zbigniew J. Witczak²⁾

¹⁾Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Tamka 12, PL-91-403 Łódź, Poland

²⁾Department of Pharmaceutical Sciences, Nesbitt School of Pharmacy, Wilkes University, 84 W. South Street, Wilkes-Barre, PA 18766, USA
e-mail: grzegorz.mloston@chemia.uni.lodz.pl

Jednym z najważniejszych problemów w rozwoju współczesnej syntezy organicznej jest wykorzystywanie zasad ‘zielonej chemii’ i oparcie nowych procedur o substraty bioodnawialne. W ostatniej dekadzie obserwuje się szybki wzrost zainteresowania (–)levoglukosenonem (LGO) (**1**), który należy do pochodnych cukrowych (biochemikalia) i jest pozyskiwany w postaci czystego enancjomeru (1*S*,5*R*) na drodze pirolizy celulozy, prowadzonej w temp. 100 °C, w obecności kwasu siarkowego H₂SO₄ (wydajność: 10%; czystość: 98%).^[1] Z powodu obecności wiązań C=O i C=C, LGO może być traktowany jako α,β-nienasycony keton do wykorzystania w syntezie organicznej jako substrat (‘*chiron reagent*’) do syntez związków biologicznie czynnych (medicinal chemistry)^[2a] oraz materiałów o specjalnych właściwościach (materials chemistry).^[2b]

W serii naszych ostatnich publikacji opisaliśmy jego nowe cykloaddycje z takimi odczynnikami, jak: tropothion^[3a] ((8+2) cycloaddition), fluorowane nitryloiminy^[3b] i tiokarbonylo *S*-metanidy^[3c] ((3+2) cycloadditions) oraz thiochalcones^[3d] (*hetero*-Diels-Alder reactions), prowadzące do odpowiednich policyklicznych *N*- and *S*-heterocykli **2–5** (fused heterocycles), połączonych ze szkieletem levoglukosenonu (Schemat).



Schemat. Levoglukosenon (LGO, **1**) i cykloaddukty **2–5** otrzymane w odpowiednich reakcjach cykloaddycji z: tropotionem, nitryloiminami, tiokarbonylo *S*-metanidami oraz tiochalkonami.

W wykładzie zostaną omówione mechanizmy badanych reakcji cykloaddycji z użyciem LGO (**1**) jako dieno- lub dipolarofila, a także obserwowana, wysoka stereoselektywność tych reakcji. Struktury nowych pochodnych lewoglukosenonu ustalono metodami spektroskopowymi (¹H, ¹³C NMR); w reprezentatywnych przypadkach potwierdzono je wynikami analizy rentgenostrukturalnej.

Literatura:

- [1] J. Klepp, W. Dillon, Y. Lin, P. Feng, B.W. Greatrex, *Org. Synth.* **2020**, 97, 38
 [2] a) J. E. Camp, B. W. Greatrex, *Front. Chem.* **2022**, 10, 902239; b) B. Pollard, M. G. Gardiner, M. G. Banwell, L. A. Connal, *ChemSusChem* **2024**, 17, e202301165.
 [3]] a) G. Młostoń, M. Celeda, M. Palusiak, *Carbohydr. Res.* **2023**, 529, e108844; b) G. Młostoń, K. Urbaniak, M. Palusiak, Z. J. Witczak, E.-U. Würthwein, *Molecules* **2023**, 28, 7348; c) G. Młostoń, M. Celeda, M. Palusiak, H. Heimgartner, Z. J. Witczak *Molecules* **2026**, submitted; d) G. Młostoń, K. Urbaniak, M. Palusiak, E.-U. Würthwein, H.-U. Reissig, Z. J. Witczak, *Molecules* **2025**, 30, 3783.



S01 WS02

Wybrane optycznie czynne związki zawierające stereogeniczny /i lub achiralny heteroatom: aspekty historyczne i nowe wyniki

Józef Drabowicz^{1,2} Patrycja Pokora-Sobczak¹, Kamil Bugaj², Jacek Chrzanowski¹, Adrian Zając³, Remigiusz Żurawinski¹, Grażyna Mielniczak¹, Luca Sancineto⁴, Michał Rachwalski⁵

¹Instytut Chemii, Uniwersytet Jana Długosza w Częstochowie, 42-200 Częstochowa, Armii Krajowej 13-15, Polska;

²Dział Chemii Organicznej, Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, 90-363 Łódź, Sienkiewicza 112; ³Poznański Park Naukowo-Technologiczny ul. Rubież 46, 61-612 Poznań, Polska ⁴Group of Catalysis, Synthesis and Organic Green Chemistry Department of Pharmaceutical Sciences, University of Perugia, Via del Liceo 1, 06123 Perugia Italy, ⁵Katedra Chemii Organicznej i Stosowanej, Wydział Chemii Uniwersytet Łódzki, Tamka 12 91-403 Łódź, Polska

W rozwoju stereochemii, jako subdyscypliny chemii organicznej, optycznie czynne związki ze stereogenicznym heteroatomem odegrały i nadal posiadają bardzo istotne znaczenie. Ich historyczna rola wynika między innymi z umożliwienia poparcia poglądu, że wolną parę elektronów można uznać za ekwiwalent podstawnika realnego. A później, od lat 80, związki te odegrały niezwykle ważną rolę jako chiralne substancje pomocnicze w syntezie asymetrycznej [1]. Niniejszy wykład rozpocznie się od kilku komentarzy historycznych dotyczących rozwoju tej tematyki, a następnie przedstawione zostaną wybrane niepublikowane lub bardzo niedawno opublikowane wyniki dotyczące syntezy, określania struktury i analitycznej użyteczności odpowiednio zaprojektowanych modelowych związków heteroorganicznych. Dotyczą one m.in.:

1. prób uzyskania, między innymi, chiralnych cieczy jonowych na bazie racemicznych i optycznie czynnych (enancjomerycznych i diastereoizomerycznych) soli optycznie czynnych kwasów *t*-butylarylotiofosfinowych
2. prób asymetrycznego utleniania arylotrifluorometylosulfidów, ArSCF₃, do odpowiadających im chiralnych sulfotlenków, ArS(O)CF₃, w warunkach standardowych i mechanochemicznych [2]
3. syntezy optycznie czynnych tiomoczników pochodzących z enancjomeru (*S*)-1-(2-pirydylo)etyloaminy[3]
4. nieoczekiwanego powstania chiralnego spiro-systemu w reakcji dilitio-pochodnej alkoholu heksafluorokumylowego z *N*-(*t*-butylosulfenyl)ftalimidem [4]

Podziękowanie: Autorzy pragnę podziękować Panu prof. Józsefowi Rabaiowi (Landlord University, Budapest) za udostępnienie kolekcji siarczków arylo- prefluoroalkilowych oraz Pani dr. Anicie Wróblewskiej za zainteresowanie i użyteczne komentarze.

1 Drabowicz J.. Stereochemistry of organic sulfur compounds: More than 100 years of history, current state and further challenges *Phosphorus Sulfur and Silicon and the Related Elements*, 2017, **192**, 145-148 .

2.a) A. Wróblewska, *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, **2023**, 198(6), 513–516. b)K. Bugaj, P. Pokora-Sobczak, G. Mielniczak, L. Sancineto, C. Santi, J. Drabowicz, *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*, **2023**, 1–9. <https://doi.org/10.1080/10426507.2023.228147>

3. Chrzanowski, J., Rachwalski, M., Sancineto, L., Deska, M., Drabowicz, J. *Symmetry*, **2025**, 17,216, doi.org/10.3390/sym.17020216.

4. Zając, A., Sieroń L., Żurawiński R., Drabowicz, J. *ChemPlusChem* 2024, e202400614

Od acetylenów i diynów do funkcjonalizowanych nanografenów

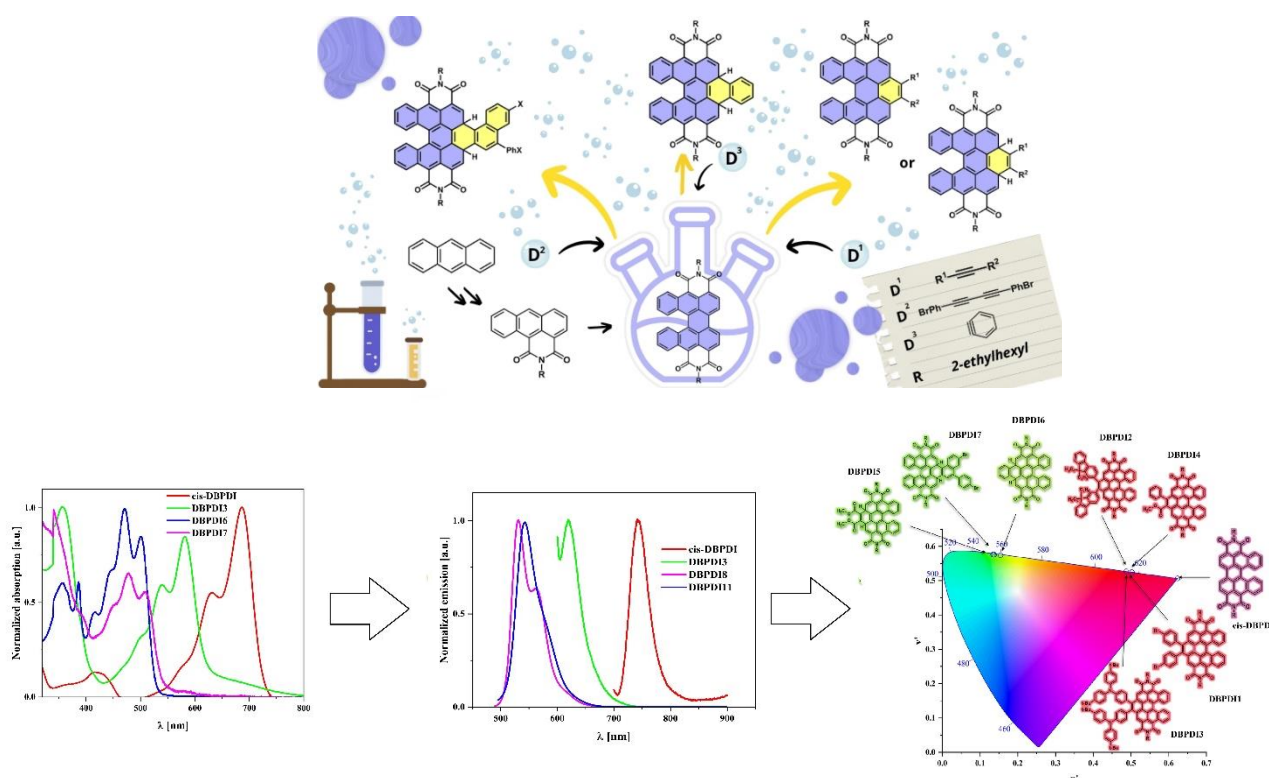
Stanisław Krompiec, Patrycja Filipek, Angelika Mieszczanin

Uniwersytet Śląski w Katowicach; Politechnika Śląska

44-122 Gliwice, ul. Kochanowskiego 25/19;

stanislaw.krompiec@us.edu.pl

Nanografeny molekularne, w tym funkcjonalizowane (FMN), tj. posiadające odpowiednio zaprojektowane i odpowiednio usytuowane w strukturze grupy funkcyjne to ocean wiedzy i zastosowań - książki, publikacje, patenty, technologie, urządzenia. Wykład będzie poświęcony nanografenom, które swoją strukturę zawdzięczają alkinom, diynom, fluorantenowi, perylenowi i ich pochodnym oraz narzędziom syntetycznym, które pozwoliły na odpowiednie połączenie w/w elementów w finalny produkt. Narzędzia syntetyczne to: cykloaddycja [4+2], domino cykloaddycja-cykloizomeryzacja, sprzęganie. Zgodnie ze współczesnymi wymogami część syntetyczna była wspomagana obliczeniami DFT: energii aktywacji cykloaddycji, barier rotacji podstawników, mechanizmu reakcji, FMO - energia, lokalizacja. Poglądowo, przykłady finalnych struktur FMN przedstawiono poniżej - strukturą bazową była pochodna perylenobisimidu. Narzędzia syntetyczne: cykloaddycja Dielsa-Aldera dipodstawionych acetylenów oraz domino cykloaddycja-cykloizomeryzacja z udziałem 1,4-diarylobuta-1,3-diynów. Analiza właściwości FMN: analiza termiczna, optyka, elektrochemia, obliczenia DFT.



Analogiczne podejście do syntezy FMN bazujących na strukturze perylenu, perylenotetraestru oraz bisantenu doprowadziło do całej gamy FMN. Z kolei w przypadku fluorantenu substratami były: dietylnonaftaleny, acetyleny i diyny. Natomiast narzędzia syntetyczne stanowiły: cykloaddycja i utleniające sprzęganie.

Rotory molekularne o architekturze steroidowej

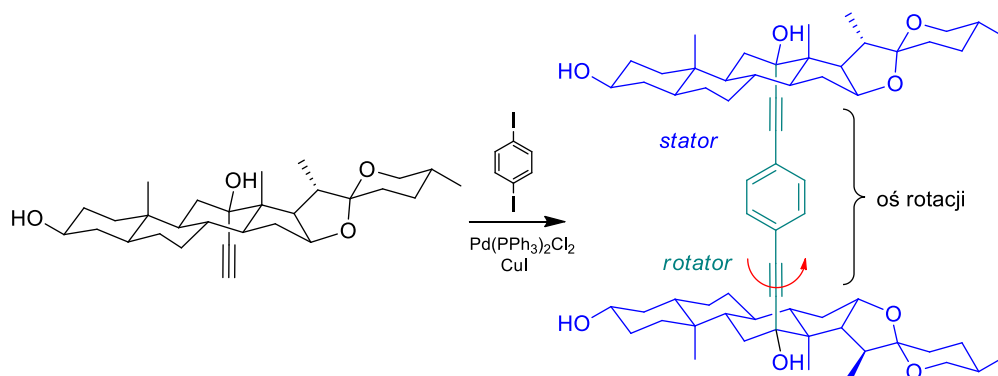
Izabella Jastrzębska

Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok
i.jastrzebska@uwb.edu.pl

Natura wykształciła niezwykle efektywne mechanizmy umożliwiające kontrolowanie ruchu na poziomie molekularnym poprzez przekształcanie energii chemicznej w energię mechaniczną. Synteza rotorów molekularnych oraz innych maszyn molekularnych stanowi próbę naśladowania tych ewolucyjnie ukształtowanych układów, funkcjonujących w organizmach żywych, takich jak kinezy, miozyny, wici bakteryjne czy helikazy [1].

Rotory molekularne zbudowane są z dwóch części, z których jedna wykonuje ruch obrotowy względem drugiej. Element o mniejszym momencie bezwładności względem osi obrotu określany jest mianem *rotatora*, natomiast element o większym momencie bezwładności pełni funkcję *statora*.

Związki steroidowe wykorzystywane jako statory zapewniają wysoką sztywność konstrukcji, homochiralność oraz dużą zdolność do krystalizacji, co czyni je szczególnie atrakcyjnymi substratami do tego typu układów [2,3]. Kluczowym etapem opracowanej strategii syntezy rotorów molekularnych jest reakcja sprzęgania Sonogashiry pomiędzy pochodną steroidową a 1,4- diodobenzenem, prowadząca do otrzymania odpowiednich prekursorów do dalszej funkcjonalizacji (Rys. 1).



Schemat 1. Synteza steroidowego rotora molekularnego [4].

Podczas wykładu zostanie również omówiony usieciowany materiał polimerowy zawierający steroidowe rotory molekularne oraz jego właściwości dynamiczne i potencjalne zastosowania [5].

Podziękowanie: Wyposażenie dla BioNanoTechno Uniwersytetu w Białymstoku zostało sfinansowane ze środków UE w ramach Programu Operacyjnego Rozwój Polski Wschodniej 2007-2013, projekt: POPW.01.03.00-20-034/09-00.

1. M. E. Ochoa *et al.*, Crystal Growth & Design, 2019, 19, 6114-6126; b) J. Shen *et al.*, Science China Chemistry, 2021, 64, 1-7.
2. K. Vargas-Romero *et al.*, The Journal of Organic Chemistry, 2020, 85, 8501-8509.
3. T. Pawlak *et al.*, Crystal Growth & Design, 2020, 20, 2202-2216.
4. I. Jastrzębska *et al.*, Crystal Growth & Design, 2016, 16, 5698-5709.
5. J. Wysocka *et al.*, ChemPhysChem 2024, e202300739.

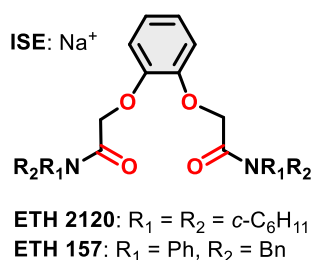
Od jonoforów sodowych do selektywnej ekstrakcji litu

Kajetan Dąbrowa

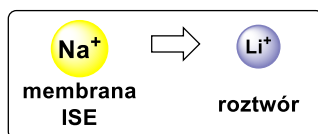
Afiliacja; Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk
 adres korespondencyjny; Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa
 e-mail kdabrowa@icho.edu.pl

Rosnące zapotrzebowanie na lit kieruje uwagę ku strumieniom, które dziś pozostają poza obiegiem surowcowym. Trójkąt litowy, obejmujący solniska w Chile, Argentynie i Boliwii, dostarcza blisko połowę światowej produkcji litu, pozyskiwanego głównie przez ewaporację. W procesach tych często traci się około połowy litu wskutek współwytrącania z solami sodu, potasu i magnezu.[1] Bezpośrednia ekstrakcja z fazy stałej do ciekłej (SLE) pozwala na odzysk soli litu z takich materiałów bez konieczności wcześniejszego rozpuszczania całej matrycy nieorganicznej. Rozwój tej koncepcji ogranicza jednak złożoność strukturalna znanych receptorów litu, utrudniająca ich syntezę w większej skali, a wcześniejsze badania SLE ograniczały się wyłącznie do skali analitycznej.[2]

Jonofory sodowe II i III



Odwrócona selektywność



NMR • DFT • XRD • SLE

Selektywne ekstraktanty litu



100 g mieszanki
 Li/M > 3000

Rys. 1. Od jonoforów sodowych do skalowalnej ekstrakcji LiCl.

W naszych badaniach wykazaliśmy, że komercyjne jonofory sodowe II i III, stosowane od lat 70. XX wieku w elektrodach jonoselektywnych na Na⁺,[3] w roztworze wykazują wyraźną preferencję wobec Li⁺. Na bazie ich wspólnego szkieletu opracowaliśmy rodzinę modularnych ekstraktantów, łatwo dostępnych w skali wielogramowej.[4] Badania NMR, DFT oraz rentgenostrukturalne ujawniły pięciokoordynacyjny sposób wiązania Li⁺, w którym cząsteczka wody stanowi integralny element kompleksu i wspomaga transfer LiCl do fazy organicznej. Po raz pierwszy wykazano możliwość półpreparatywnej SLE LiCl z wieloskładnikowej mieszaniny soli, uzyskując niemal ilościowy odzysk produktu o czystości >95% i selektywnościach Li/Na, Li/K i Li/Mg >3000.

Połączenie odwróconej selektywności, prostej syntezy i skuteczności w większej skali tworzy praktyczną platformę do odzysku litu ze stałych strumieni materiałowych. Obecnie rozwijamy jej warianty do ekstrakcji ciecz/ciecz (LLE), ukierunkowanej na bezpośrednią separację litu z solanek oraz roztworów powstających podczas przerobu zużytych baterii litowo-jonowych.

Finansowanie: Narodowe Centrum Nauki, grant OPUS 2022/47/B/ST5/01787.

Literatura:

- [1] G. Gutiérrez, D. Ruiz-León, *Mater. Adv.* **2024**, 5, 7850; Y. Gao *et al.*, *Miner. Eng.* **2024**, 216, 108837.
- [2] J. M. Mahoney, A. M. Beatty, B. D. Smith, *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 7617; N. J. Heo *et al.*, *Chem. Sci.* **2024**, 15, 13958; Y. Du *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2025**, 147, 20205.
- [3] D. Ammann *et al.*, *Helv. Chim. Acta* **1975**, 58, 1535.
- [4] J. Narodowicz *et al.*, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, 65, e3249075; EP25159602.9; PCT/EP2026/055029.

Wspomagana mikrofalami synteza 2-jodoglikali i jej zastosowanie do otrzymania glikoporfiryn na potrzeby terapii fotodynamicznej

Maciej Malinowski,^a Dariusz Baran,^a Jakub Mitrzak,^a Ilona Grabowska-Jadach,^a Agnieszka Ewa Kuklewska,^a Areta Czerwińska,^a Magdalena Puła,^a Bartłomiej Stankiewicz,^a Karolina Hurej,^b Aneta Pobudkowska-Mirecka,^a Andrzej Plichta^a

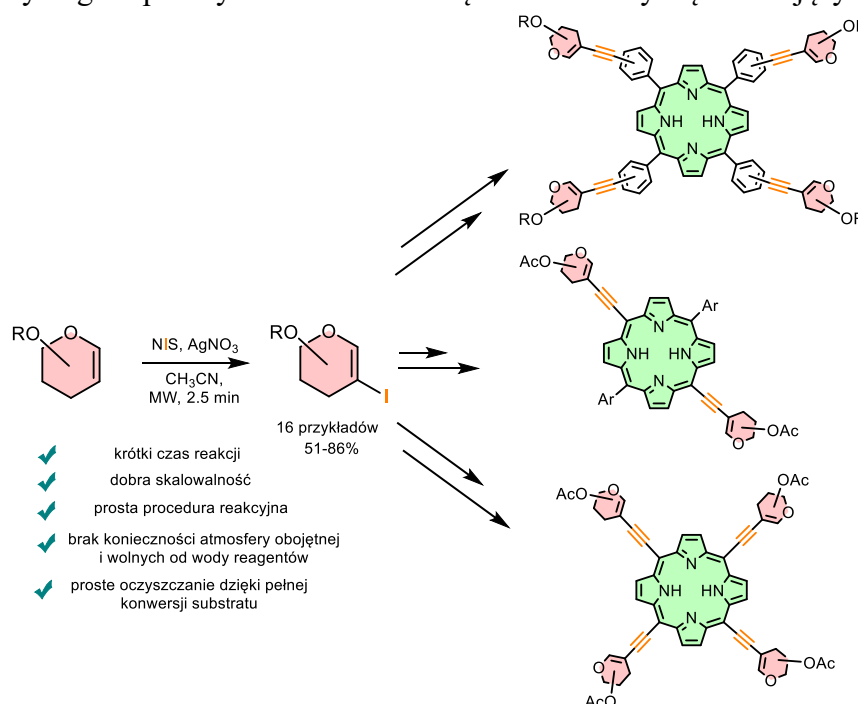
^aPolitechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa;

^bUniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

e-mail: maciej.malinowski@pw.edu.pl

W ostatnich latach nasz zespół intensywnie rozwija koncepcję wykorzystania 2-jodoglikali w syntezie unikatowych fotouczulaczy na potrzeby terapii fotodynamicznej (PDT).^[1-5] Dotychczas rozwój tej tematyki był w pewnym stopniu ograniczany ze względu na trudność otrzymania dużych ilości cukrowych substratów do sprzęgań metaloorganicznych. W trakcie wystąpienia omówiona zostanie nowa procedura jodowania glikali z wykorzystaniem promieniowania mikrofalowego, która rozwiązuje niemal wszystkie problemy technologiczne powiązane z szeroką dostępnością 2-jodoglikali.^[6]

Przedyskutowane zostaną także nasze dotychczasowe badania nad wykorzystaniem tych struktur do syntezy C-C połączonych glikoporfiryn.^[1,2] Finalne związki cechowały się obiecującym profilem terapeutycznym, niską cytotoksycznością ciemną przy wysokiej fotocytotoksyczności oraz zwiększonym wychwytem komórkowym.^[5] Z kolei odpowiednio połączone glikoniugaty porfiryne wykazywały się przesunięciem pasm absorpcji w kierunku podczerwieni i możliwością generowania reaktywnych form tlenu promieniowaniem z zakresu okna biologicznego.^[3,4]



Podziękowanie: Badania finansowane przez Narodowe Centrum Nauki (Sonata 19, 2023/51/D/ST5/00384).

- [1] B. Godlewski, D. Baran, M. de Robichon, A. Ferry, S. Ostrowski, M. Malinowski, *Org. Chem. Front.* **2022**, 9, 2396–2404.
- [2] B. Godlewski, M. Malinowski, *Adv. Synth. Catal.* **2024**, 366, 2956–2966.
- [3] D. Baran, M. Malinowski, *Org. Lett.* **2025**, 27, 7779–7784.
- [4] J. Mitrzak, M. Malinowski, *ACS Org. Inorg. Au* **2026**, DOI 10.1021/acsorginorgau.6c00033.
- [5] H. Chmielewska, D. Baran, A. M. Czerwińska, B. Godlewski, M. Malinowski, I. Grabowska-Jadach, *J. Photochem. Photobiol. B Biol.* **2026**, 280, 113472.
- [6] D. Baran, A. E. Kuklewska, M. de Robichon, B. Stankiewicz, K. Hurej, A. Pobudkowska, A. Plichta, A. Ferry, M. Malinowski, *Chemistry–Methods* **2026**, 6, DOI 10.1002/cmt.70113.



Komunikaty sekcyjne

Makrocykliczne receptory jako narzędzia stabilizacji klastrów wody

Magdalena Ceborska¹, Kajetan Dąbrowa²

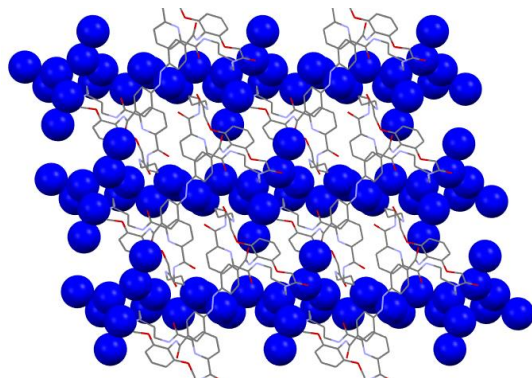
¹Wydział Matematyczno-Przyrodniczy, Szkoła Nauk Ścisłych, Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego, Wóycickiego 1/3, 01-815 Warszawa

²Instytut Chemii Organicznej PAN, Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa
m.ceborska@uksw.edu.pl

Woda jest podstawowym składnikiem organizmów żywych i środowiskiem, w którym zachodzi większość procesów biologicznych. Jej unikalne właściwości, wynikające z rozbudowanej sieci wiązań wodorowych, determinują strukturę biomakrocząsteczek, oddziaływania molekularne oraz przebieg reakcji biochemicznych. Organizacja cząsteczek wody w otoczeniu biomolekuł odgrywa kluczową rolę w procesach rozpoznawania molekularnego, wiązania ligandów i katalizy enzymatycznej [1]. Zrozumienie sposobu organizacji i stabilizacji cząsteczek wody, w tym tworzenia klastrów, ma zatem istotne znaczenie dla chemii supramolekularnej i biologii molekularnej.

Receptory makrocykliczne dzięki preorganizowanym lukom mogą stabilizować uporządkowane klastry wody – od pojedynczych cząsteczek H₂O po bardziej złożone agregaty – umożliwiając badanie ich struktury i właściwości. Analiza takich układów dostarcza informacji o naturze wiązań wodorowych oraz organizacji wody w ograniczonej przestrzeni. Do receptorów zdolnych do stabilizacji klastrów wody należą m.in. rezorcynareny [2], kryptandy [3] oraz niedomknięte kryptandy [4].

W prezentacji omówione zostaną różne klasy receptorów makrocyklicznych stabilizujących klastry wody oraz porównane ich właściwości strukturalne i zdolność do organizacji cząsteczek H₂O. Szczególna uwaga zostanie poświęcona niedomkniętym kryptandom jako receptorom umożliwiającym stabilizację struktur wody o zróżnicowanej architekturze – od prostych dimerów, poprzez cykliczne oktamery i łańcuchy, aż po rozbudowane wielocząsteczkowe taśmy wodne (Rys. 1).



Rys.1 Taśma H₂O stabilizowana przez szcypcową pochodną niedomkniętego kryptandu

1. (a) Ling, G. *Chem. Phys. Med. NMR* **2004**, 36, 1–19. (b) Laage, D.; Elsaesser, T.; Hynes, J. T. *Chem. Rev.* **2017**, 117, 10694–10725.
2. Poole, D. A.; Mathew, S.; Reek, J. N. H. *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, 143, 16419–16427.
3. Kang, S. O.; Powell, D.; Day, V. W.; Bowman-James, K. *Cryst. Growth Des.* **2007**, 7, 606–608.
4. Dąbrowa, K.; Ceborska, M.; Jurczak, J. *Cryst. Growth Des.*, **2014**, 14, 4906–4910. (a) Dąbrowa, K.; Ceborska, M.; Jurczak, J. *Supramol. Chem.*, **2018**, 5–6, 464–472. (b) Dąbrowa, K.; Ceborska, M.; Jurczak, J. *Molecules*, **2021**, 26, 2787. (c) Dąbrowa, K.; Ceborska, M.; Mart, M.; Jurczak, J. *Cryst. Growth Des.* **2026**, 26, 32–40.

Od aromatyczności do antyaromatyczności - kompleksy rodu i irydu z N-odwróconą porfiryką

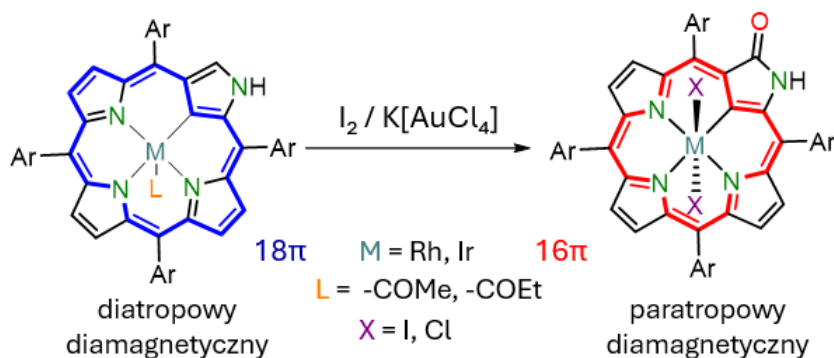
Kinga Szydelko^a, Michał J. Białek^a, Piotr J. Chmielewski^a

^aUniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

*e-mail: kinga.szydelko@uwr.edu.pl

N-odwrócona porfiryka (NCP) jest izomerem porfiryry, w którym jeden z pierścieni pirolowych został odwrócony, co prowadzi do powstania nietypowego rdzenia koordynacyjnego NNNC oraz obecności zewnętrznego atomu azotu. Taka budowa nadaje makrocyklowi wyjątkowe właściwości koordynacyjne i redoksove oraz umożliwia stabilizację nietypowych struktur elektronowych kompleksów metali przejściowych [1,2].

Reakcja NCP z kompleksami rodu i irydu w mieszaninie toluenu z alkoholami prowadzi do powstania płaszczyznowo chiralnych, diamagnetycznych związków koordynacyjnych Rh(III) i Ir(III) o aromatycznym charakterze, zawierających aksjalnie skoordynowane ligandy acylowe. Badania reaktywności otrzymanych związków wobec czynników utleniających wykazały, że zarówno jod, jak i anion tetrachlorozłocianowy(III) inicjują przebudowę układu elektronowego makrocyklu, prowadząc do przejścia od aromatycznego do antyaromatycznego porfiryroidu. Powstające produkty zachowują centrum metaliczne i stanowią stabilne antyaromatyczne pochodne laktamowe. Strukturę oraz właściwości otrzymanych kompleksów scharakteryzowano z wykorzystaniem spektroskopii NMR, rentgenografii strukturalnej oraz obliczeń DFT. Otrzymane wyniki pokazują, że kompleksy Rh(III) i Ir(III) z N-odwróconą porfiryką stanowią interesującą klasę układów redoksovo przelączalnych, umożliwiających kontrolowaną zmianę aromatyczności makrocyklu przy zachowaniu centrum metalicznego.



Rysunek 1. Redoksovo indukowane przelączanie aromatyczności makrocyklu przy zachowaniu centrum metalicznego.

Literatura:

- [1] P. J. Chmielewski, L. Latos-Grażyński, K. Rachlewicz, T. Głowiak, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **1994**, 33, 779.
- [2] M. Toganoh, H. Furuta, *Chem.Rev.* **2022**, 122, 8313.
- [3] A. Srinivasan, M. Toganoh, T. Niino, A. Osuka, H. Furuta, *Inorg. Chem.* **2008**, 47, 11305.

Niezwykła chemia piriporfiryn — od kontrolowanej inwersji pierścienia do kontrakcji pirydyny

Karolina Hurej, Paulina Krzyszowska, Michał J. Białek, Lechosław Latos-Grażyński

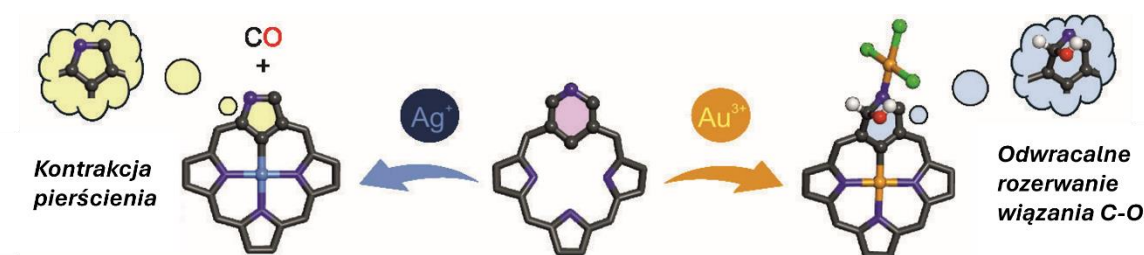
Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław,

e-mail: karolina.hurej@uwr.edu.pl

W ostatnich latach chemia koordynacyjna karbaporfiryn stała się popularnym obszarem badań. Makrocykle te budzą duże zainteresowanie ze względu na zdolność do tworzenia kompleksów, w których metale przyjmują nietypowe stopnie utlenienia. Wykazują również nietrywialną reaktywność związaną z tworzeniem wiązań metaloorganicznych. Pomimo licznych badań chemia koordynacyjna piriporfiryn - makrocykli, w których jeden z pierścieni pirolowych został zastąpiony pierścieniem pirydynowym - pozostaje słabo poznana. Jednak badania reaktywności piriporfiryn, niezależnie od sposobu wbudowania pierścienia sześciocznego, pokazują unikatowy charakter tej chemii. [1-3]

Jednym z takich przykładów jest di-*p*-pirirubiryna. Podczas stopniowego miareczkowania kwasem zaobserwowaliśmy kontrolowaną inwersję sześciocząłowych pierścieni. W rezultacie możliwe jest uzyskanie trzech podstawowych konformerów. [4] Ponadto kompleksy di-*p*-pirirubiryny z jonami palladu(II) dają dobrą odpowiedź w spektroskopii fotoakustycznej. [5]

Innym przykładem jest 3-aza-*meta*-benziporfiryna, w której pierścień pirydynowy ulega kontrakcji, tworząc pierścień pirolowy. Badając niezwykłą chemię koordynacyjną N-odwróconej piriporfiryny z jonami srebra i złota, zaobserwowaliśmy ten proces i uzyskaliśmy szereg kompleksów o nietrywialnej reaktywności. Obejmuje ona m.in. odwracalne rozszczepianie wiązań C–O oraz selektywną demetalację zewnętrznego jonu metalu. [6]



1. Das, M. and A. Srinivasan, *Chem. Commun.*, **2023**, 59, 11780-11790.
2. Lash, T.D., *Chem. Rev.*, **2017**, 117, 2313-2446.
3. Hurej, K. and L. Latos-Grażyński, *A Pincer Motif Etched into a meta-Benziporphyrin Frame*, in *Metal-Ligand Co-operativity: Catalysis and the Pincer-Metal Platform*, G. van Koten, K. Kirchner, and M.-E. Moret, Editors. **2021**, Springer International Publishing: Cham. p. 181-225.
4. R. Myśliński, K. Hurej, M. Pawlicki, L. Latos-Grażyński, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, 57, 16866-16870
5. K. Hurej, W. Oszczyda, E. Opas, S. J. Zelewski, M. Pawlicki, M. J. Białek, Ł. Orzeł, L. Latos-Grażyński, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202303394
6. P. Krzyszowska, A. Burska-Jabłońska, M. Oberski, M. J. Białek, L. Latos-Grażyński, K. Hurej, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, e25506.

Nitronorborneny jako produkty reakcji Dielsa–Aldera metylocyklopentadienu z cyjanonitrostyrenami – podejście eksperymentalne i obliczeniowe

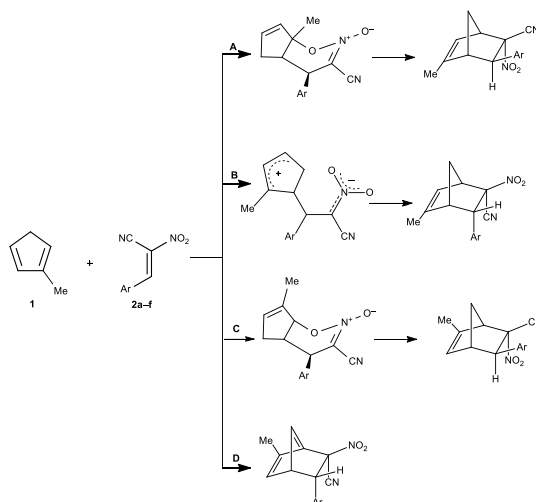
Agnieszka Łapczuk

Politechnika Krakowska im. T. Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Katedra Chemii i Technologii Organicznej

ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

agnieszka.lapczuk@pk.edu.pl.

Analogi cyklopentadienu (1) reagują z cyjanonitrostyrenami (2a-f) w reakcji Dielsa–Aldera, prowadząc do otrzymania funkcjonalizowanych nitronorbornenów - związków o potencjalnych właściwościach biologicznych oraz szerokich możliwościach zastosowania jako cenne intermediary w syntezie organicznej. W pracy przedstawiono wyniki badań eksperymentalnych i teoretycznych dotyczących mechanizmu tej reakcji. Na podstawie obliczeń kwantowo-chemicznych wyznaczono profile energetyczne wszystkich możliwych ścieżek reakcyjnych oraz przeanalizowano wpływ środowiska reakcji na ich przebieg. Dla jednej ze ścieżek wykazano, że zmiana rozpuszczalnika prowadzi do powstania produktu pośredniego o charakterze zwiterjonowym. Strukturę oraz właściwości elektronowe tego intermediatu scharakteryzowano z wykorzystaniem analiz ELF, NPA, MEP i NCI. Ponadto omówiono wpływ charakteru podstawników obecnych w pierścieniu fenylowym cyjanonitrostyrenów na reaktywność i selektywność procesu. Badania teoretyczne przeprowadzono z wykorzystaniem pakietu Gaussian 16 na poziomie teorii ω B97X-D/6-311G(d), a uzyskane wyniki zestawiono z rezultatami badań eksperymentalnych.



Schemat 1. Ścieżki reakcji metlocyklopentadienu 1 z cyjanonitrostyrenem 2a-f.

Elektrochemiczne alkoksylowanie jako nowoczesne narzędzie w syntezie związków fosforoorganicznych

Jakub Adamek, Agnieszka Październiak-Holewa, Anna Kuźnik, Dominika Kozicka

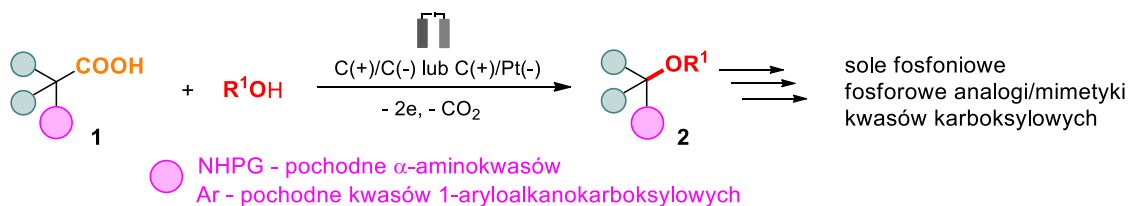
¹Katedra Chemii Organicznej, Bioorganicznej i Biotechnologii, Politechnika Śląska;

²Centrum Biotechnologii, Politechnika Śląska;

jakub.adamek@polsl.pl

Metody elektrochemiczne zyskują coraz większe znaczenie w syntezie związków organicznych. W porównaniu z klasycznymi rozwiązaniami wyróżniają się wysoką selektywnością i wydajnością, możliwością prowadzenia reakcji w łagodnych warunkach oraz łatwym generowaniem reaktywnych produktów pośrednich, takich jak rodniki, karbokationy czy kationy iminiowe. Dodatkową zaletą jest ograniczenie ilości powstających odpadów, co sprawia, że synteza elektroorganiczna wpisuje się w założenia zielonej chemii.

Dobrym przykładem wykorzystania metod elektrochemicznych jest reakcja dekarboksylacji, którą można przeprowadzić z wysoką wydajnością, eliminując jednocześnie konieczność stosowania wysokiej temperatury oraz katalizatorów opartych na metalach przejściowych.^{1,2} Proces ten może przebiegać z udziałem rodnikowych (reakcja Kolbego, prowadząca do dimeryzacji rodników) lub kationowych produktów pośrednich (reakcja typu *non*-Kolbe).^{3,4} O charakterze powstającego produktu pośredniego decydują przede wszystkim struktura substratu oraz warunki prowadzenia reakcji, takie jak gęstość prądowa, stężenie substratu czy rodzaj zastosowanej elektrody. Obecność grup zdolnych do stabilizacji dodatniego ładunku, takich jak grupa aminowa (-NHPG w *N*-zabezpieczonych aminokwasach) lub aromatyczna (kwas 1-aryloalkanokarboksylowy, np. profeny – klasa niesteroidowych leków przeciwzapalnych), w bezpośrednim sąsiedztwie grupy karboksylowej sprzyja powstawaniu kationowych produktów pośrednich. Umożliwia to ich łatwą funkcjonalizację, na przykład poprzez wprowadzenie grupy alkoksylowej (Schemat 1).



Schemat 1. Strategia syntezy związków fosforoorganicznych z wykorzystaniem elektrochemicznego dekarboksylacyjnego α-alkoksylowania.

Głównym celem wystąpienia jest zaprezentowanie możliwości wykorzystania elektrochemicznego alkoksylowania na etapie funkcjonalizacji szkieletu cząsteczki (*scaffold diversification*) w syntezie związków fosforoorganicznych takich jak sole fosfoniowe, fosforowe analogi α-aminokwasów lub związki bisfosforowe.

Praca została dofinansowana w ramach rektorskiego grantu projakościowego. Politechnika Śląska, numer grantu: 04/020/RGJ25/1112.

1. M. Patel *ACS Omega* **2026**, *11*, 11001–11048.
2. Ch.-Q. Deng, J. Deng *Green Chem.*, **2025**, *27*, 275–292.
3. F.J. Holzhäuser, J.B. Mensah, R. Palkovits, *Green Chem.*, **2020**, *22*, 286–301.
4. M. Yan, Y. Kawamata, P.S. Baran, *Chem. Rev.* **2017**, *117*, 13230–13319.



S01 KS06

Sekwencyjna synteza mechanochemiczna pochodnych 1,2,4-oksadiazoli

Agata Grobelna, Mikołaj Walter, Karol Biernacki, Ksawery Maroski, Janusz Rachoń, Dariusz Witt i Sebastian Demkowicz

*Katedra Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska;
Gabriela Narutowicza 11/12;
e-mail: agata.grobelna@pg.edu.pl*

1,2,4-oksadiazole stanowią istotną klasę pięciocłonowych związków heterocyklicznych. Od czasu ich pierwszego otrzymania pod koniec XIX wieku [1] układ 1,2,4-oksadiazolu zyskał znaczenie jako ważny motyw strukturalny w chemii medycznej. Pochodne zawierające ten pierścień wykazują szerokie spektrum aktywności biologicznej, obejmujące m.in. właściwości przeciwwirusowe, przeciwbakteryjne, przeciw pasożytnicze oraz przeciwzapalne [2]. Ponadto pochodne 1,2,4-oksadiazolu są rozpatrywane jako bioizosteryczne odpowiedniki grup estrowych i amidowych, co może korzystnie wpływać na stabilność metaboliczną oraz właściwości farmakokinetyczne projektowanych związków [3]. Klasyczne metody otrzymywania pochodnych 1,2,4-oksadiazoli obejmują:

- 1,3-dipolarną cykloaddycję nitryli z tlenkami nitryli,
- heterocyklizację amidoksymów z aktywowanymi kwasami karboksylowymi lub ich pochodnymi.

Pomimo szerokiego zastosowania, procedury te wymagają używania rozpuszczalników organicznych, podwyższonej temperatury oraz długich czasów reakcji. Z tego względu rozwój bardziej zrównoważonych metod syntezy tej klasy heterocykli pozostaje istotnym wyzwaniem syntetycznym. Jednym z narzędzi umożliwiających ograniczenie wyżej wymienionych aspektów jest mechanochemia, w której przemiany chemiczne inicjowane są energią mechaniczną dostarczaną m.in. podczas mielenia kulowego [4]. Technika ta, również doskonale wpisuje się w założenia zielonej chemii, gdzie procesy projektowane są z myślą o jak najmniejszym wpływie na środowisko naturalne. Oznacza to eliminację lub ograniczenie stosowania rozpuszczalników organicznych, skracanie czasu syntezy oraz upraszczanie procedur eksperymentalnych [5].

Prezentowana praca stanowi rozwinięcie wcześniejszych badań nad mechanochemiczną syntezą pochodnych 1,2,4-oksadiazoli z amidoksymów. W ramach poprzedniego etapu opracowano i porównano ścieżki oparte na trzech klasach reagentów: aktywowanych kwasach karboksylowych, chlorkach kwasowych oraz estrach. Obecnie strategia ta została rozszerzona o sekwencyjne podejście jednonaczyniowe, w którym pierwszy etap obejmuje mechanochemiczne otrzymywanie benzamidoksymu bezpośrednio z benzonitrylu i hydroksyloaminy. Następnie, bez izolacji powstałego amidoksymu, do mieszaniny reakcyjnej wprowadzany jest kwas karboksylowy wraz z odczynnikiem aktywującym, co umożliwia dalszą heterocyklizację prowadzącą do otrzymania związków zawierających pierścień 1,2,4-oksadiazolu.

Zastosowanie podejścia sekwencyjnego ogranicza liczbę operacji jednostkowych i eliminuje konieczność izolacji produktu pośredniego, jednocześnie zwiększając uniwersalność syntetyczną metody. Dobór odpowiedniego nitrylu oraz kwasu karboksylowego umożliwia bowiem niezależne modyfikowanie podstawników w pozycjach C3 i C5 pierścienia 1,2,4-oksadiazolu. Opracowana strategia stanowi zatem obiecującą ścieżkę syntetyczną do szybkiego i bardziej zrównoważonego otrzymywania pochodnych 1,2,4-oksadiazoli stosując techniki mechanochemiczne.

Słowa kluczowe: mechanochemia, mielenie kulowe, 1,2,4-oksadiazole.

Supramolekularne materiały perowskitowe oparte na kompleksach Rh(III) i Ir(III) wykazujące modulowaną luminescencję oraz właściwości dielektryczne

Kinga Szczecińska^{a,b}, Jan Rzepiela^b, Tomasz Charytanowicz^b, Mikołaj Żychowicz^{a,b}, Jakub J. Zakrzewski^b, Sebastian Baś^b, Szymon Chorąży^b

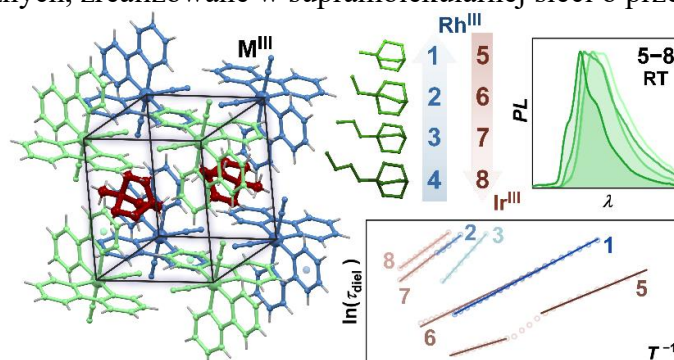
^aSzkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Uniwersytet Jagielloński, Kraków, Polska; ^bWydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, Kraków, Polska

adres korespondencyjny: Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, Polska

e-mail: kinga.szczecinska@doctoral.uj.edu.pl

Chemia materiałowa w ostatnich latach skupia się na projektowaniu materiałów o wzajemnie powiązanych oraz wysoce przestrajalnych właściwościach fizycznych, co pozwala na tworzenie efektywnych oraz czułych przełączników lub sensorów, operujących na poziomie molekularnym. Jednymi z najszerzej badanych wielofunkcyjnych materiałów są perowskity, m.in. z uwagi na ich właściwości optyczne oraz możliwości magazynowania energii.^[1] Dalsza funkcjonalizacja tego typu materiałów poprzez odpowiedni dobór części jonowych pozwala na otrzymanie molekularnych hybryd, wykazujących dodatkowe właściwości fizyczne, takie jak luminescencja w ciele stałym bądź nieliniowe efekty optyczne, często dodatkowo czułe na czynniki zewnętrzne.^[2,3]

Prezentowane badania dotyczą serii organiczno-nieorganicznych materiałów hybrydowych o ogólnym wzorze $[\text{Alk-dabco}][\text{M}^{\text{III}}(\text{CN})_2(\text{ppy})_2]$ (Alk-dabco = N-alkilowane kationy 1,4-diazabicyklo[2.2.2]oktanu; Alk/M = Me/Rh (1), Et/Rh (2), *n*Pr/Rh (3), *n*Bu/Rh (4), Me/Ir (5), Et/Ir (6), *n*Pr/Ir (7), *n*Bu/Ir (8); ppy = karboanion 2-fenylpirydyny, Rys. 1). Cyklometalowane kompleksy jonu M(III) tworzą w nich supramolekularne klatki typu perowskitowego, które goszczą mobilne kationy organiczne. Wykazują one połączenie wrażliwej na czynniki zewnętrzne luminescencji kompleksów Rh(III) i Ir(III), opartej na procesie przeniesienia ładunku (CT), z relaksacjami dielektrycznymi wprowadzonymi dzięki obecności kationów organicznych. Pozwala to na wzajemne modulowanie obu właściwości fizycznych, zrealizowane w supramolekularnej sieci o przestrajalnych klatkach.^[4]



Rys. 1. Reprezentatywny rzut strukturalny przedstawiający supramolekularne klatki perowskitowe obecne w materiałach 1–8 (lewo i środek góra); właściwości luminescencyjne związków 5–8 opartych na Ir(III) w temperaturze pokojowej (prawo góra) oraz zależność Arrheniusa dla czasów relaksacji dielektrycznych związków 1–3 i 5–8 (prawo dół).

Bibliografia

- [1] W. Li, Z. Wang, F. Deschler, S. Gao, R. H. Friend, A. K. Cheetham, *Nat. Rev. Mater.* **2017**, 2, 16099
- [2] A. Hoffman, M. Zychowicz, J. Wang, K. Matsuura, F. Kagawa, J. Rzepiela, M. Heczko, S. Baś, H. Tokoro, S. Ohkoshi, S. Chorąży, *Chem. Sci.* **2025**, 16, 8979
- [3] M. Liberka, M. Zychowicz, J. Hooper, K. Nakabayashi, S. Ohkoshi, S. Chorąży, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e2022308284
- [4] K. Szczecińska, J. Rzepiela, M. Zychowicz, T. Charytanowicz, S. Baś, J. J. Zakrzewski, S. Chorąży, *Mater. Chem. Front.* **2026**, DOI: 10.1039/D6QM00201C



S01 KS08

Alternatywna metoda usuwania grup *O*- i *N*-benzylowych z użyciem 1,1,3,3-tetrametylodisiloksanu (TMDS) i polimetylohydrosiloksanu (PMHS)

Maciej Grauzenis,^{a,b} Teresa Olszewska^b

^a Zakłady Farmaceutyczne POLPHARMA S.A., ul. Pelplińska 19, 83-200 Starogard Gdański

^b Katedra Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk
e-mail: maciej.grauzenis@pg.edu.pl

Grupa benzylowa (Bn) jest jedną z najczęściej stosowanych grup ochronnych w syntezie organicznej ze względu na łatwość jej wprowadzania oraz dobrą tolerancję na zróżnicowane warunki reakcji, w tym środowisko kwasowe, zasadowe i utleniające.¹ Znajduje szerokie zastosowanie w ochronie ugrupowań aminowych, hydroksylowych i karboksylowych, a transformacje z jej udziałem często stanowią integralny etap syntezy licznych farmaceutyków, materiałów funkcjonalnych oraz produktów naturalnych.² Klasyczną metodą usuwania grup benzylowych jest katalityczne uwodornienie prowadzone z użyciem wodoru gazowego w obecności palladu osadzonego na węglu aktywnym (Pd/C).³ Pomimo wysokiej skuteczności podejście to cechuje się ograniczoną chemoselektywnością i może prowadzić do niepożądanego redukcji innych grup funkcyjnych obecnych w cząsteczce. Ponadto, wykorzystanie wodoru gazowego w procesach realizowanych na skalę przemysłową wiąże się z koniecznością spełnienia rygorystycznych wymagań bezpieczeństwa wynikających z jego łatwopalnego i wybuchowego charakteru oraz stosowania instalacji przeznaczonych do magazynowania, transportu i dozowania tego gazu. W związku z tym opracowanie wydajnych i selektywnych procedur debenzylacji wykorzystujących alternatywne donory wodoru pozostaje przedmiotem zainteresowania zarówno środowiska akademickiego, jak i przemysłowego.

Celem przeprowadzonych badań było opracowanie alternatywnej metody usuwania grup *O*-benzylowej i *N*-benzylowej z wykorzystaniem organosilanów: 1,1,3,3-tetrametylodisiloksanu (TMDS) oraz polimetylowodorosiloksanu (PMHS) jako bezpiecznych donorów wodoru, a także zwilżonego wodą katalizatora Pd/C. Użycie tanich i powszechnie dostępnych reagentów eliminuje konieczność stosowania wodoru cząsteczkowego, zwiększając bezpieczeństwo procesu oraz znacząco ograniczając wymagania aparaturowe. Zaproponowane warunki umożliwiają prowadzenie reakcji pod ciśnieniem atmosferycznym i w temperaturze 40°C. Uzyskane wyniki potwierdziły wysoką skuteczność opracowanego rozwiązania w rozszczepianiu estrów i eterów benzylowych oraz *N*-benzylowych amin, prowadząc do odpowiednich alkoholi, kwasów karboksylowych i amin z wydajnościami w zakresie 82-98%. Dodatkową zaletą opracowanej metody jest możliwość efektywnego usuwania produktów ubocznych z wykorzystaniem standardowych operacji jednostkowych stosowanych w przemyśle, takich jak ekstrakcja, destylacja i krystalizacja, bez konieczności implementacji chromatografii preparatywnej lub innych kosztownych technik separacyjnych. Dzięki eliminacji wodoru gazowego, wykorzystaniu łatwo dostępnych surowców oraz możliwości oczyszczania produktów wyłącznie przy użyciu konwencjonalnych operacji technologicznych, przedstawiona metoda stanowi atrakcyjną alternatywę dla klasycznej reakcji debenzylacji i wykazuje wysoki potencjał wdrożeniowy w procesach przemysłowych.

Podziękowanie: Badania finansowane przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach programu „Doktorat wdrożeniowy”, nr projektu DWD/8/0253/2024. Autorzy dziękują Zakładom Farmaceutycznym POLPHARMA S.A. za wsparcie finansowe oraz udostępnienie pomieszczeń laboratoryjnych i infrastruktury badawczej.

¹ Wuts, P. G. M.; Greene, T. W. Protection for the Amino Group. In *Greene's Protective Groups in Organic Synthesis*; Wiley, 2006; pp 696–926.

² Jin, J. H.; An, M.; Jeon, M.; Kim, J.; Kang, S. M.; Choi, I. Sustainable Approaches for the Protection and Deprotection of Functional Groups. *Chem. – A Eur. J.* **2025**, *31*, e202501387.

³ Lou, S.; Jin, J.; Wang, Q.; Xu, X.; Zhang, Q.; Li, X. The Application of Palladium Catalysts in Catalyzing the Hydrogenolysis of *N*-Benzyl Compounds. *Appl. Catal. A Gen.* **2024**, *682*, 119802.



Sesja posterowa



S01 P01

Barwniki azowe jako innowacyjne sensybilizatory polimeryzacji rodnikowej w zakresie światła UV-Vis

Alicja Balcerak-Woźniak, Janina Kabatc-Borcz

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej
ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz
alicia.balcerak@pbs.edu.pl*

Polimeryzacja inicjowana światłem stanowi popularną metodę otrzymywania materiałów polimerowych znajdujących zastosowanie w przemyśle, medycynie oraz nowoczesnych technologiach. Możliwość kontroli przebiegu reakcji w czasie i przestrzeni, wysoka wydajność procesu oraz niewielkie zużycie energii sprawiają, że fotopolimeryzacja zyskuje coraz większe znaczenie jako efektywna technika wytwarzania polimerów.

Istotą procesu fotopolimeryzacji jest wykorzystanie energii promieniowania elektromagnetycznego do aktywacji układu fotoinicjującego. W wyniku absorpcji światła, wzbudzona cząsteczka fotoinicjatora ulega dekompozycji tworząc formy reaktywne, zdolne do zapoczątkowania reakcji polimeryzacji. Wprowadzenie do układu fotoinicjującego odpowiedniego barwnika jako sensybilizatora umożliwia przesunięcie zakresu działania fotoinicjatora w kierunku światła widzialnego.

Chociaż w literaturze można znaleźć liczne przykłady dwu- i trójskładnikowych układów fotoinicjujących zawierających różnego rodzaju barwniki organiczne, zastosowanie barwników azowych jako sensybilizatorów w tego typu systemach nie zostało dotąd zbadane. Z tego względu istotne jest określenie potencjału aplikacyjnego barwników azowych w procesie fotopolimeryzacji.

Celem niniejszej pracy było zbadanie zdolności fotoinicjujących nowych, dwuskładnikowych systemów zawierających barwniki azowe w roli sensybilizatorów oraz sole oniove jako koinicjatory do polimeryzacji rodnikowej akrylanów. Na podstawie uzyskanych wartości parametrów kinetycznych procesu fotopolimeryzacji, tj. stopień konwersji wiązań podwójnych monomeru oraz szybkość polimeryzacji wyznaczono najbardziej efektywny system fotoinicjujący. Stwierdzono, że barwniki azowe w połączeniu z odpowiednim koinicjatorem mogą pełnić rolę wydajnych fotoinicjatorów polimeryzacji w zakresie światła UV-Vis.

1. S. Yang, P. Chen, H. Fu, Y. Li, L. Li, W. Li, S. Song, R. Xu, Q. Pan, Y. Xin, J. Fan, X. Peng, *Dyes Pigment.*, 2025, 235, 112640.
2. S. Parida, A.K. Mandal, A.K. Behera, S. Patra, R. Nayak, C. Behera, M. Jena, J. *Water Process Eng.*, 2025, 70, 107088.
3. A. Balcerak-Woźniak, M. Dzwonkowska-Zarzycka, J. Kabatc-Borcz, *Mater. Sci. Eng. B*, 2026, 328, 119306.

Nowa metoda syntezy 2-jodoglikali z wykorzystaniem promieniowania mikrofalowego

Dariusz Baran,^a Agnieszka Ewa Kuklewska,^a Morgane de Robichon,^b Bartłomiej Stankiewicz,^a Karolina Hurej,^c Aneta Pobudkowska,^a Andrzej Plichta,^a Angélique Ferry,^b Maciej Malinowski^a

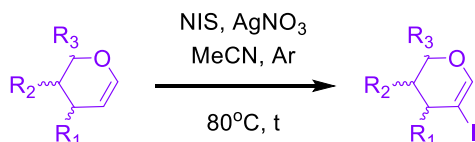
^aWydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej; Stanisława Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa;

^bBioCIS, CNRS, CY Cergy-Paris Université, Cergy-Pontoise cedex, Francja;

^cWydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław;
dariusz.baran.dokt@pw.edu.pl

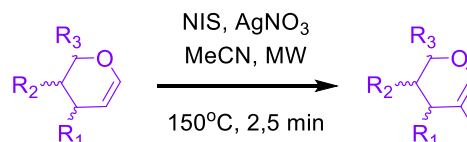
Glikale stanowią rodzinę pochodnych cukrowych charakteryzującą się wiązaniem podwójnym pomiędzy atomami węgla C1 a C2 w strukturze pierścienia. Obecność tego wiązania pozwala na funkcjonalizację tej grupy sacharydów za pomocą reakcji 2-jodowania, skutkującej przyłączeniem atomu jodu w pozycji winylowej substancji. Umożliwia to przeprowadzenie następnych reakcji sprzęgania z wykorzystaniem metali przejściowych pozwalających na połączenie otrzymanego syntonu cukrowego do ogromnej ilości potencjalnych struktur. Dotychczas, najlepsza metoda syntezy 2-jodoglikali cechowała się jednak szeregiem różnych wad, które uniemożliwiały komercyjny dostęp do tej rodziny pochodnych cukrowych.¹ Ze względu na to, została opracowana zaktualizowana metoda 2-jodowania glikali pozwalająca na uzyskanie szeregu pochodnych różnych cukrów z wieloma możliwymi grupami zabezpieczającymi (Schemat 1).²

Klasyczna metoda



- Przeciętne wydajności
- Konieczność stosowania gazu obojętnego
- Konieczność stosowania świeżo destylowanego acetonitrylu
- Trudny proces oczyszczania produktu
- Wysoka pracochłonność
- Niska powtarzalność procesu
- Bardzo trudne powiększanie skali

Nowa metoda z wykorzystaniem mikrofal



- ✓ Wysokie wydajności
- ✓ Brak konieczności stosowania gazu obojętnego
- ✓ Możliwość stosowania handlowego acetonitrylu
- ✓ Proste oczyszczanie produktu
- ✓ Niska pracochłonność
- ✓ Wysoka powtarzalność procesu
- ✓ Łatwe powiększanie skali

Schemat 1. Porównanie klasycznej oraz nowo opracowanej metody syntezy 2-jodoglikali.

Wykorzystując opracowaną metodę otrzymano z bardzo dobrymi wydajnościami wiele znanych 2-jodoglikali w dużej skali oraz kilka nowych nieznanych wcześniej pochodnych takich jak 2-jodofukal czy 2-jodomaltotriol. Ponadto, uzyskano także sfunkcjonalizowaną pochodną znanego leku na cukrzycę – akarbozy.

Badania zostały sfinansowane z projektu NCN Sonata 19 (2023/51/D/ST5/00384); Metaloorganiczny mariaż cukrów z porfirynami. Ku nowym fotouczulaczom.

1. S. Dharuman and Y. D. Vankar, N-Halosuccinimide/AgNO₃ - Efficient Reagent Systems for One-Step Synthesis of 2-Haloglycals From Glycals: Application in the Synthesis of 2C-Branched Sugars *via* Heck Coupling Reactions, *Organic Letters* 16 (2014): 1172–1175.

2. D. Baran, A.E. Kuklewska, M. de Robichon, B. Stankiewicz, K. Hurej, A. Pobudkowska, A. Plichta, A. Ferry and M. Malinowski, *Chemistry-Methods* 2026, 6, e70113.

Kontrolowane rozpuszczalnikiem pułapkowanie konformacyjne funkcjonalizowanego glicyną benzeno-1,3,5-trikarboksyamidu (BTA) - przejścia fazowe pod lupą NMR i PXRD

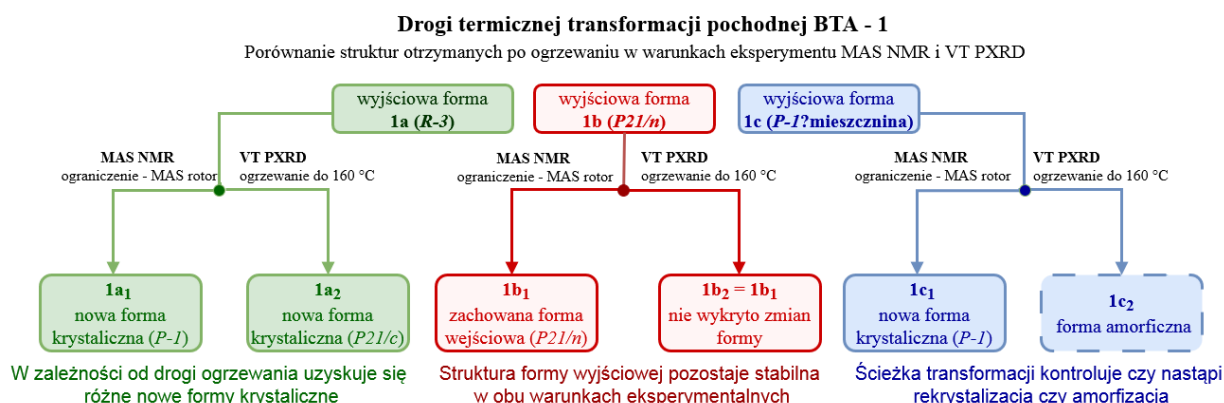
Irena Bak-Sypień, Kacper Drużbicki, Piotr Paluch, Tomasz Pawlak, Rafał Dolot, Marek J. Potrzebowski

Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych, Polska Akademia Nauk,
ul. Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź
irena.bak-sypien@cbmm.lodz.pl

Benzeno-1,3,5-trikarboksyamidy (BTA) są ważnymi układami modelowymi chemii supramolekularnej ze względu na rdzeń o symetrii C_3 i trzy grupy amidowe sprzyjające tworzeniu sieci wiązań wodorowych podczas gdy funkcjonalizacja peryferyjna umożliwia kontrolę nad upakowaniem cząsteczek, ścieżkami samoorganizacji i reakcją na bodźce zewnętrzne.^[1,2,3]

Zbadano mechanizm termotropowych przejść fazowych (kryształ-kryształ) trzech form solwatowanych N,N',N'' -tris(karboksymetylo)-1,3,5-benzenotrikarboksamidu (1): hydratu 1a (ok. 3 H_2O), solwatu eteru dietylowego 1b oraz niejednorodnej formy 1c (ok. 3,5 H_2O).

Wykorzystano analizę termiczną (DSC/TGA), temperaturową dyfrakcję proszkową (VT-PXRD), NMR w ciele stałym, periodyczne obliczenia DFT i przewidywanie struktur krystalicznych (CSP). Szczególną uwagę zwrócono na rolę rodzaju rozpuszczalnika i warunki jego usuwania. Formy 1a i 1c generują różne fazy w warunkach MAS NMR i PXRD, podczas gdy 1b zachowuje strukturę wyjściową. Dyfrakcja pozwoliła określić motywy upakowania, natomiast przesunięcia ^{15}N NMR wraz z modelowaniem ujawniły subtelne różnice konformacyjne. Droga termiczna kontroluje zatem zarówno pułapkowanie konformacji, jak i uporządkowanie dalekiego zasięgu.



Literatura:

- [1] Adrianna Szmulewicz, Grzegorz Markiewicz, Artur R. Stefankiewicz: Chem. Commun. (2026) 62 (45): 11245–11256.
- [2] Anna Walczak, Grzegorz Markiewicz, Michał Gliński, Miroslava Čonková, Artur R. Stefankiewicz: J. Org. Chem. (2025) 90 (41): 14557–14564.
- [3] Ran Sun, Yi-Zhi Li, Junfeng Bai, Yi Pan: Crystal Growth & Design (2007) 7 (5): 890–894.

Niniejsza praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu OPUS 25 LAP: „Uczenie maszynowe i zaawansowana krystalografia NMR – komplementarne narzędzia do optymalizacji dróg syntezy, przewidywania i rozwiązywania struktur złożonych układów ko-krystalicznych oraz ich amorficznych analogów” (nr umowy : 2022/47/1/ST4/01629).

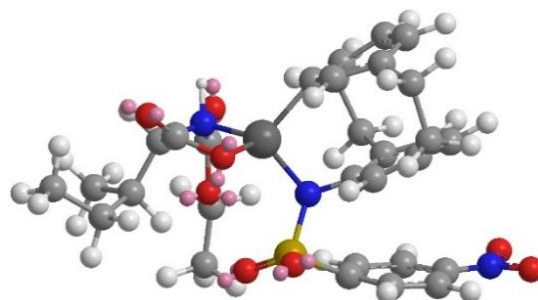
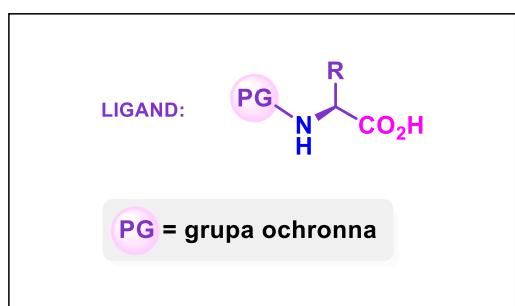
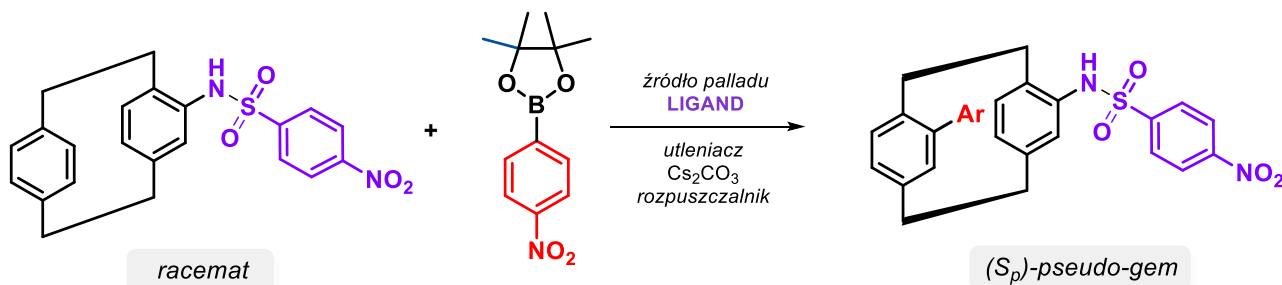
Proste kompleksy palladu jako klucz do chiralności: Regio- i enancjoselektywna aktywacja wiązań C–H paracyklofanu

Zuzanna Dadziak, Rafał Kowalczyk, Michał Błauciak

Katedra Chemii Bioorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska;
 wyb. Wyspiańskiego 29, 50-370 Wrocław;
 271986@student.pwr.edu.pl

Aktywacja wiązań C–H stanowi skuteczną strategię bezpośredniej funkcjonalizacji związków organicznych, umożliwiając modyfikację nieaktywnych wiązań C–H bez konieczności ich wcześniejszej transformacji. Jednym z istotnych wyzwań pozostaje jednak uzyskanie wysokiej regio- i stereoselektywności, szczególnie w przypadku złożonych układów aromatycznych¹.

Szkielet [2.2]paracyklofanu, charakteryzujący się sztywną geometrią oraz chiralnością planarną, stanowi interesujący układ do badań nad stereoselektywną aktywacją C–H.² W badaniach wykorzystano sulfonamid [2.2]paracyklofanu jako układ umożliwiający rzadką ale selektywną aktywację pozycji pseudo-geminalnej. Celem pracy było opracowanie układu katalitycznego pozwalającego na stereoróżnicowanie enancjomerów racemicznego substratu z wykorzystaniem rozdziału kinetycznego. Przeprowadzono optymalizację kluczowych parametrów reakcji, obejmującą dobór chiralnego aminokwasu, źródła palladu, utleniacza, rozpuszczalnika oraz zasady. Szczególną uwagę poświęcono wpływowi chiralnego liganda na stereoselektywność procesu.



W wyniku optymalizacji opracowano układ katalityczny umożliwiający selektywną funkcjonalizację pozycji pseudo-geminalnej, prowadzącą do produktów o wysokiej wydajności i wysokiej enancjoselektywności.

¹ Jamie H. Docherty et al., „Transition-Metal-Catalyzed C–H Bond Activation for the Formation of C–C Bonds in Complex Molecules”, *Chemical Reviews* 123, nr 12 (2023): 7692–760, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00888>.

² Yang Zhao et al., „Synthesis of Paracyclophanes with Planar and Central Chirality: Kinetic Resolution of [2.2]Paracyclophane Aldimines via Palladium-Catalyzed Addition of Arylboronic Acids”, *Organic Chemistry Frontiers* 6, nr 24 (2019): 3956–60, <https://doi.org/10.1039/C9QO01011D>.



S01 P05

Estry oksymowe na bazie benzotiazolu w fotopolimeryzacji akrylanów.

Monika Dzwonkowska-Zarzycka, Janina Kabatc-Borc

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej
ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz
Monika.Dzwonkowska-Zarzycka@pbs.edu.pl*

Fotopolimeryzacja odgrywa kluczową rolę w otrzymywaniu materiałów polimerowych. Jej szerokie wykorzystanie wynika z szeregu zalet, takich jak: szybkość procesu, brak konieczności stosowania rozpuszczalników oraz możliwość kontroli czasowej i przestrzennej. Jednym z kluczowych składników mieszaniny fotoutwardzalnej jest fotoinicjator. W ostatnich latach zauważono wzrost zainteresowania estrami oksymowymi i zastosowania ich w procesach aktywowanych światłem. Celem badań było zaprojektowanie fotoinicjatorów opartych na szkielecie benzotiazolu, zawierających ugrupowanie estru oksymowego, oraz określenie ich właściwości fotochemicznych. Przeprowadzono badania spektroskopowe, fotolizę w warunkach stacjonarnych, pomiary elektrochemiczne oraz analizy termiczne. Szczególną uwagę poświęcono procesowi fotopolimeryzacji oraz wpływowi struktury chemicznej na parametry tego procesu, takie jak: stopień konwersji monomeru (C_{FTIR}), czas indukcji (t_{ind}) oraz szybkość polimeryzacji (R_p). Zaproponowano również mechanizm fotorozpadu estrów oksymowych. Stwierdzono, że zsyntetyzowane związki mogą stanowić innowacyjne, wydajne i perspektywiczne fotoinicjatory, kompatybilne ze źródłami LED emitującymi promieniowanie z zakresu bliskiego UV.



S01 P06

Zastosowanie spektrometrii mas w identyfikacji mikroplastiku w preparatach tkankowych tarczycy ze zmianami nowotworowymi

Beata Kolesińska¹, Marta Góralczyk¹, Joanna Lewandowska¹, Hanna Romanowicz², Beata Smolarz²

¹Instytut Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, Żeromskiego 114, 90-543 Łódź

²Zakład Patomorfologii Klinicznej, Instytut Centrum Zdrowia Matki Polki, Rzgowska 281/289, 93-338 Łódź

beata.kolesinska@p.lodz.pl

Wpływ mikroplastiku na zdrowie człowieka to jeden z najbardziej palących tematów we współczesnej toksykologii i medycynie. Choć badania nad tym zagadnieniem wciąż trwają, zebrane dotychczas dowody naukowe budzą poważny niepokój. Mikroplastik i nanoplastik przenikają do naszych organizmów wraz z wodą oraz wdychanym powietrzem. Wykazany został wpływ mikro- i nanoplastiku na chroniczny proces zapalny, stres oksydacyjny, zaburzenia układu hormonalnego, blaszki miażdżycowe, zaburzenia równowagi mikrobiomu jelitowego [1]. Potwierdzono obecność mikroplastiku w ludzkiej krwi (wykryty u ok. 80% badanych osób), płucach, łożysku i mleku matki, (co sugeruje narażenie organizmu już na etapie prenatalnym) oraz sercu [2].

Wpływ mikroplastiku na rozwój nowotworów (proces kancerogenezy) to obecnie jeden z najbardziej dynamicznie badanych obszarów medycyny środowiskowej. Badania laboratoryjne (*in vitro*) oraz na modelach zwierzęcych (*in vivo*) pozwoliły na poznanie mechanizmów, na drodze których mikroskopijne cząstki tworzyw sztucznych mogą inicjować, promować i przyspieszać rozwój raka. Cząsteczki mikroplastiku zostały znalezione w guzach jelita grubego, płuc oraz prostaty w znacznie wyższych stężeniach niż w otaczających je zdrowych tkankach.

Celem badań było sprawdzenie, czy metoda MALDI-MS będzie użyteczna do badania obecności mikroplastiku w preparatach histopatologicznych tarczycy. Zastosowana metoda pozwoliła na zarejestrowanie widm wzorcowych polipropylenu (PP), polietylenu (PE), polistyrenu (PS) oraz poli(glikol etylenowego) (PEG) [3].

Zastosowanie obrazowania MALDI-IMS do analizy tkanek tarczycy umożliwiło detekcję mikroplastiku w strukturze tkankowej, zarówno ze zmianami nowotworowymi jak i w otaczających je niezmiennych chorobowo tkankach. Przeprowadzona analiza statystyczna uzyskanych danych wskazuje na istnienie korelacji między intensywnością kumulacji danego typu mikroplastiku a zmianami nowotworowymi (rak brodawkowy tarczycy). Dodatkowym elementem badań była identyfikacja specyficznych dodatków polimerowych, co pozwoliło na dokładniejszą charakterystykę syntetycznych związków obecnych w badanym materiale histopatologicznym.

[1] Saha, U., et al. (2024). Detrimental consequences of micropolymers associated plasticizers on endocrinal disruption. *Materials Today Bio*, 27, 101139. <https://doi.org/10.1016/j.mtbio.2024.101139>

[2] Dzierżyński, E., et al. (2025). Post-mortem evidence of microplastic bioaccumulation in human organs: Insights from advanced imaging and spectroscopic analysis. *Archives of Toxicology*, 99, 4051–4066. <https://doi.org/10.1007/s00204-025-04092-2>

[3] Wu, P., et al. (2020). Determination of environmental micro(nano)plastics by matrix-assisted laser desorption/ionization-time-of-flight mass spectrometry. *Analytical Chemistry*, 92(21), 14346–14356. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.0c01928>

Mechanochemiczna synteza i charakterystyka strukturalna soli pirydoksyny z izomerycznymi kwasami dihydroksybenzoesowymi

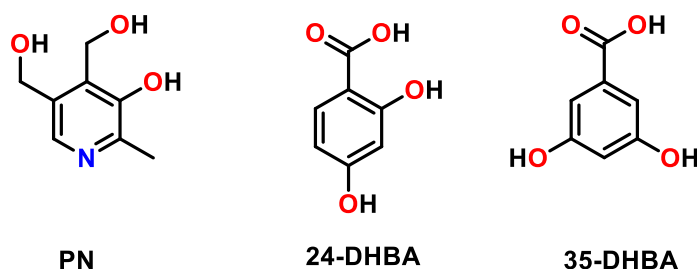
Anna Komasa¹, Zofia Dega-Szafran¹, Mateusz Gołdyn^{1,2}, Elżbieta Bartoszak-Adamska¹,
Karolina Babijczuk¹, Milena Rożewska¹

¹Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza,
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;

²Centrum Zaawansowanych Technologii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza,
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 10, 61-614 Poznań;
aniak@amu.edu.pl

Modyfikacja właściwości fizykochemicznych aktywnych składników farmaceutycznych (API) poprzez tworzenie nowych wieloskładnikowych form krystalicznych stanowi obecnie intensywnie rozwijany kierunek badań w chemii farmaceutycznej. Przykładem API wykorzystywanego do tego typu syntez jest pirydoksyna, jedna z form witaminy B₆. Dzięki obecności wolnej pary elektronowej na atomie azotu może ona tworzyć kompleksy z kwasami. Szczególnie interesującą grupę koformatorów stanowią kwasy fenolowe, znane z cennych właściwości biologicznych.

W niniejszej pracy, do tworzenia nowych układów supramolekularnych z pirydoksyną, wykorzystano izomeryczne kwasy 2,4- i 3,5-dihydroksybenzoesowe. Celem badań było opracowanie warunków syntezy mechanochemicznej oraz określenie wpływu położenia podstawników koformera na tworzenie syntonów supramolekularnych w otrzymanych solach (Rys. 1).



Rys 1. Struktura pirydoksyny (PN) i kwasów 2,4- i 3,5-dihydroksybenzoesowych (24-DHBA i 35-DHBA).

Zoptymalizowano warunki otrzymywania nowych układów metodą krystalizacji z roztworu oraz z wykorzystaniem mielenia zarówno na sucho (NG), jak i z niewielką objętością rozpuszczalnika (LAG). Badania PXRD wykazały, że reakcje mechanochemiczne NG skutkowały powstaniem faz amorficznych. Z kolei zastosowanie niewielkiej objętości etanolu umożliwiło otrzymanie nowych faz krystalicznych, których dyfraktogramy były zgodne z teoretycznymi, wygenerowanymi na podstawie struktur wyznaczonych metodą SXRD. Kluczową rolę w organizacji cząsteczek w sieci krystalicznej badanych układów odgrywały wiązania wodorowe, które scharakteryzowano za pomocą spektroskopii w podczerwieni oraz obliczeń kwantowo-chemicznych na poziomie APFD/6-311++G(d,p).

Podziękowania

Część badań została sfinansowana ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach projektu PRELUDIUM nr 2021/41/N/ST5/00503. Obliczenia przeprowadzono z wykorzystaniem infrastruktury Poznańskiego Centrum Superkomputerowo-Sieciowego (PCSS).

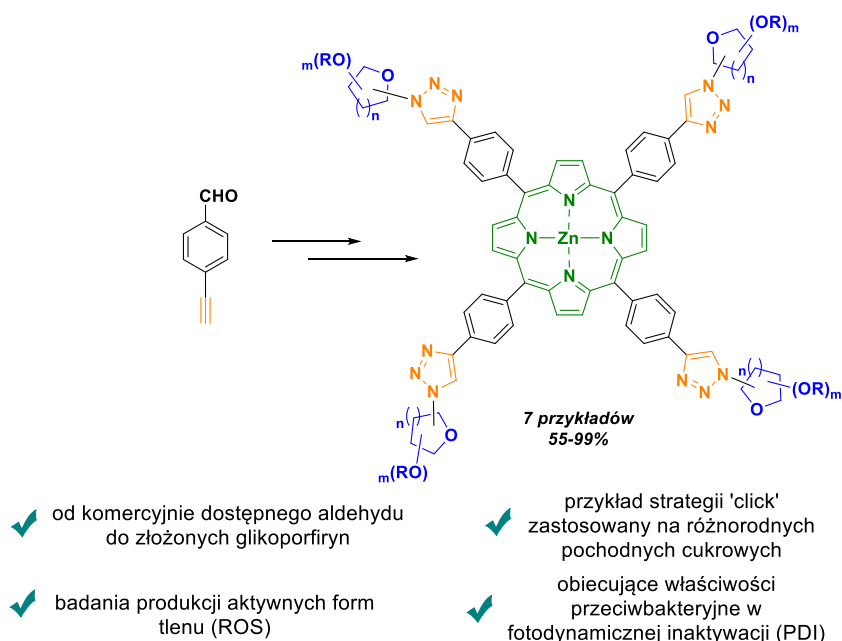
Synteza nowych glikoporfiryn z wykorzystaniem katalizowanej jonami miedzi strategii typu „click” – ścieżka do obiecujących fotouczulaczy do przeciwbakteryjnej terapii fotodynamicznej (PDI)

Maciej Malinowski,^a Katarzyna Gorczyca,^a Tomasz Kasperski,^b Agnieszka Ewa Kuklewska,^a Aleksandra Policht,^b Ilona Grabowska-Jadach,^a Dariusz Baran,^a Katarzyna Jedlińska,^c Tomasz Rowicki,^a Magdalena Strus,^b

^a Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa; ^b Uniwersytet Jagielloński Collegium Medicum, Wydział Lekarski, Czusta 18, 31-121 Kraków

^c Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie, Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki, al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
e-mail: maciej.malinowski@pw.edu.pl

Glikoporfiryny są obiecującą grupą związków do zastosowań biomedycznych jako fotouczulaczy w fototerapiach.^[1] Jednak wciąż ograniczona jest liczba uniwersalnych metod syntezy prowadzących do hybryd porfiryne-cukier. W niniejszej pracy przedstawiona zostanie metoda prowadząca do biblioteki glikoporfiryn. Jest ona wysoce wydajna i łagodna, a oparta na katalizowanej miedzią cykloaddycji azydek-alkin (CuAAC, *click chemistry*).^[2] Otrzymane związki, zawierające wolne grupy hydroksylowe, poddano badaniom chemicznym i biologicznym, które potwierdziły ich zdolność do efektywnego generowania reaktywnych form tlenu. Potencjał nowo otrzymanych glikoporfiryn wykazano w przeciwdrobnoustrojowej terapii fotodynamicznej (PDI, *photodynamic inactivation*), gdzie jeden ze związków w obecności H₂O₂ wykazywał wyjątkowo wysoką aktywność przeciwdrobnoustrojową po naświetlaniu światłem niebieskim, prowadząc do całkowitej eliminacji *Staphylococcus aureus*, *Escherichia coli* oraz *Candida albicans*.



Podziękowanie: Badania były finansowane ze środków Politechniki Warszawskiej w ramach Programu Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza (IDUB).

[1] H. Chmielewska, D. Baran, A. M. Czerwińska, B. Godlewski, M. Malinowski, I. Grabowska-Jadach, *J. Photochem. Photobiol. B Biol.* **2026**, 280, 113472.

[2] K. Gorczyca, T. Kasperski, A. E. Kuklewska, A. Policht, I. Grabowska-Jadach, D. Baran, K. Jedlińska, T. Rowicki, M. Strus, M. Malinowski, *Eur. J. Med. Chem.* **2026**, 311, 118851.



S01 P09

Optymalizacja sekwencyjnej syntezy mechanochemicznej pochodnych 1,2,4-oksadiazoli

Ksawery Maroski, Agata Grobelna, Mikołaj Walter, Karol Biernacki, Janusz Rachoń, Dariusz Witt i Sebastian Demkowicz

*Katedra Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska;
Gabriela Narutowicza 11/12;
e-mail: agata.grobelna@pg.edu.pl*

W ostatnich latach 1,2,4-oksadiazole cieszą się zwiększoną popularnością w przemyśle farmaceutycznym i chemii medycznej. Pełnią rolę bioizosterów grup estrowych i amidowych co wpływa na metabolizm oraz farmakokinetykę projektowanych związków. Farmakofory te są obecne w lekach wykazujących działania przeciwnowotworowe, przeciwłukowe, przeciwbakteryjne, przeciwdepresyjne, przeciwwirusowe lub stosowanych w terapii dystrofii mięśniowej Duchenne’a [1]. Najpowszechniejsze metody otrzymywania tego układu heterocyklicznego obejmują:

- 1,3-dipolarną cykloaddycję nitryli z tlenkami nitryli,
- heterocyklizację amidoksymów z aktywowanymi kwasami karboksylowymi lub ich pochodnymi.

Rosnące zapotrzebowanie na tego typu układy prowadzi do konieczności opracowania bardziej ekologicznych oraz selektywnych reakcji otrzymywania pochodnych 1,2,4-oksadiazoli. Klasyczne metody wymagają używania toksycznych rozpuszczalników, dużych nakładów energetycznych oraz stosowania wody do chłodzenia układów [2]. Odpowiedzią na te wyzwania jest mechanochemia, która opiera się na wykorzystywaniu energii mechanicznej do tworzenia oraz zrywania wiązań chemicznych [3]. Reakcje mechanochemiczne wykonywane są m.in. w wibracyjnych młynach kulowych, gdzie reagenty oraz kule mielące umieszczane są w specjalnych naczynkach. Mechanochemia została uwzględniona przez IUPAC jako jedna z dziesięciu najbardziej obiecujących technik w chemii [4].

Praca ta jest rozwinięciem wcześniejszych badań nad mechanochemiczną syntezą pochodnych 1,2,4-oksadiazoli z amidoksymów. Dzięki zastosowaniu techniki mechanochemicznej LAG (*ang. Liquid Assisted Grinding*), polegającej na wspomaganii mielenia rozpuszczalnikami, otrzymano benzamidoksym z benzonitrylu i hydroksyloaminy. Wykonano optymalizację parametrów takich jak: wielkość naczynek i kul, rodzaju zasad i rozpuszczalników oraz czasu mielenia. Skupiono się również na poszukiwaniu najlepszego podejścia do procesu mechanochemicznego. Sprawdzano czy techniki takie jak aktywacja hydroksyloaminy, mielenie substratów w celu zwiększenia powierzchni aktywnej, bądź też kombinacja wyżej wymienionych metod wpłynie znacząco na wydajność syntezy.

W wyniku optymalizacji nie tylko udało się przeprowadzić uprzednio niemożliwą do wykonania reakcję syntezy amidoksymu w młynie kulowym, ale jej wydajność i szybkość znacząco przewyższyła istniejące do tej pory, klasyczne metody otrzymywania tych związków. W konsekwencji stworzyło to warunki do prowadzenia sekwencyjnej syntezy mechanochemicznej pochodnych 1,2,4-oksadiazoli.

Słowa kluczowe: mechanochemia, mielenie kulowe, 1,2,4-oksadiazole.

Podziękowania: Niniejsza praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Nauki (NCN, Polska) w ramach grantu nr UMO-2020/37/N/NZ7/02535 oraz programu Radium – learning through research programs w ramach grantu nr 4/1/2023/IDUB/III.1a/Ra.

Zaburzanie uporządkowania krystalicznego: ko-amorficzne układy antagonistów receptora angiotensyny II z witaminą C

Patrycja Miara^{a,b}, Marika Turek^c, Ewa Różycka-Sokołowska^c, Marek Koprowski^a, Piotr Bałczewski^a

^a Dział Chemii Organicznej, Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, ul. Sienkiewicza 112, Łódź, 90-363, Polska

^b Szkoła Doktorska BioMedChem Uniwersytetu Łódzkiego i Instytutów PAN, ul. Matejki 21/23, 90-237 Łódź, Polska

^c Instytut Chemii, Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych, Uniwersytet Jana Długosza w Częstochowie, ul. Armii Krajowej 13/15, Częstochowa, 42-201, Polska

Ko-amorfizacja jest jedną ze strategii poprawy rozpuszczalności trudno rozpuszczalnych substancji czynnych, a odpowiednio dobrany ko-former może dodatkowo ograniczać rekrytalizację i tym samym zwiększać stabilność powstałego układu. W niniejszych badaniach zastosowano witaminę C (VitC, kwas askorbinowy) jako małowcząsteczkowy ko-former do syntezy układów ko-amorficznych z wybranymi antagonistami receptora angiotensyny II (ARB): walsartanem (VAL), telmisartanem (TEL) i losartanem (LOS-H). Szczególnie istotne było wykorzystanie VitC, która mimo silnej tendencji do krystalizacji umożliwiła otrzymanie stabilnych układów ko-amorficznych. Produkty ARB z VitC otrzymano metodą odparowania rozpuszczalnika lub ucierania na sucho w młynie kulowym. Wykazano obecność silnych oddziaływań międzycząsteczkowych, głównie wiązań wodorowych, sprzyjających stabilizacji fazy ko-amorficznej. Najbardziej stabilne układy TEL/VitC i VAL/VitC pozostawały odporne na rekrytalizację przez okres do 12 miesięcy, również przy podwyższonej wilgotności (60% RH). Szczególnie korzystne wyniki uzyskano dla układu TEL/VitC. Z postaci tabletek po 30 min uwolnienie TEL wzrosło około pięciokrotnie zarówno w wodzie, jak i w buforze PBS (pH 7,5), osiągając odpowiednio 49,55% i 82,12%. Ponadto rozpuszczalność równowagowa TEL zwiększyła się z 7,15 do 96,78 mg/L, czyli ponad 13-krotnie [1].

Wyniki pokazują, że witamina C może pełnić funkcję skutecznego i stabilnego ko-formera w układach ko-amorficznych wybranych ARB, jednocześnie poprawiając ich właściwości fizykochemiczne.



Schemat 1. Synteza układów TEL, VAL, oraz LOS-H z VitC oraz najważniejsze wnioski.

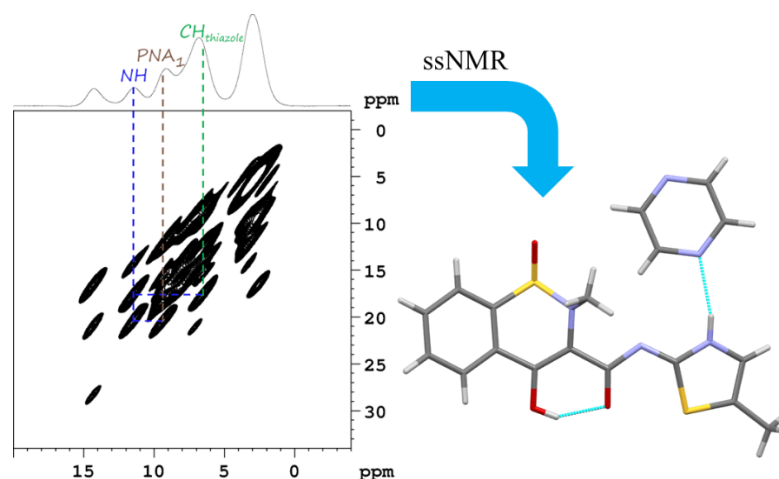
[1] Marika Turek, Ewa Różycka-Sokołowska, **Patrycja Miara**, Marek Koprowski, Piotr Bałczewski, 'Stable co-amorphous solid dispersions of antihypertensive angiotensin II receptor blockers and cardioprotective vitamin C', Advanced Powder Technology, Volume 37, Issue 7, 2026, 105312, ISSN 0921-8831, <https://doi.org/10.1016/j.apr.2026.105312>.

Motywy uprotonowania w wieloskładnikowych kryształach meloksykamu

Przemysław Nowak, Agata Jeziorna, Marcin Oszejca, Piotr Paluch, Marta K. Dudek

*Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, Szkoła Doktorska BioMedChem UŁ i
Instytutów PAN w Łodzi
przemyslaw.nowak@edu.uni.lodz.pl*

Meloksykam jest lekiem przeciwzapalnym występującym w czterech formach polimorficznych, z których jednak tylko pierwsza jest łatwa do krystalizacji. Tworzenie kryształów wieloskładnikowych meloksykamu z łatwo sublimującymi koformalami, takimi jak pirazyna, pirazol czy imidazol, stanowi kluczowy element nowego podejścia do krystalizacji trudnych do uzyskania (uchwytnych jedynie w specyficznych warunkach) polimorfów: polega ono na wytworzeniu odpowiednich kokryształów, a następnie usunięciu koformera poprzez ogrzewanie. Aby jednak w pełni zrozumieć ten proces i móc w przyszłości racjonalnie projektować takie formy, konieczne jest poznanie struktur krystalicznych tych układów. W niniejszej pracy zbadano struktury krystaliczne układów wieloskładnikowych meloksykamu z pirazyną (w stosunku 1:0,5), pirazolem (1:1) oraz imidazolem (1:1 i 1:2), a także określono w nich motywy uprotonowania metodą spektroskopii NMR w ciele stałym (ssNMR). Pomiary NMR w fazie stałej, przeprowadzone przy dwóch różnych wartościach natężenia pola magnetycznego, pozwoliły na jednoznaczne ustalenie motywu uprotonowania na atomach azotu w oparciu o wartości produktu kwadrupolowego (PQ) wyznaczone z eksperymentów ^1H - ^{14}N T-HMQC. Szczegółowe przypisanie sygnałów ^1H było możliwe dzięki przeprowadzeniu pomiarów w polu magnetycznym o wartości odpowiadającej częstotliwości rezonansowej 1 GHz dla protonu (widmo korelacji ^1H - ^1H przedstawiono na Rys. 1). Połączenie spektroskopii NMR w fazie stałej z metodami rentgenograficznymi umożliwiło pełny opis czterech nowych struktur kryształów wieloskładnikowych meloksykamu.



Rys. 1. Widmo ^1H - ^1H DQ-SQ Back-to-Back zarejestrowane na spektrometrze 1 GHz dla układu meloksykam-pirazyna.

Podziękowania

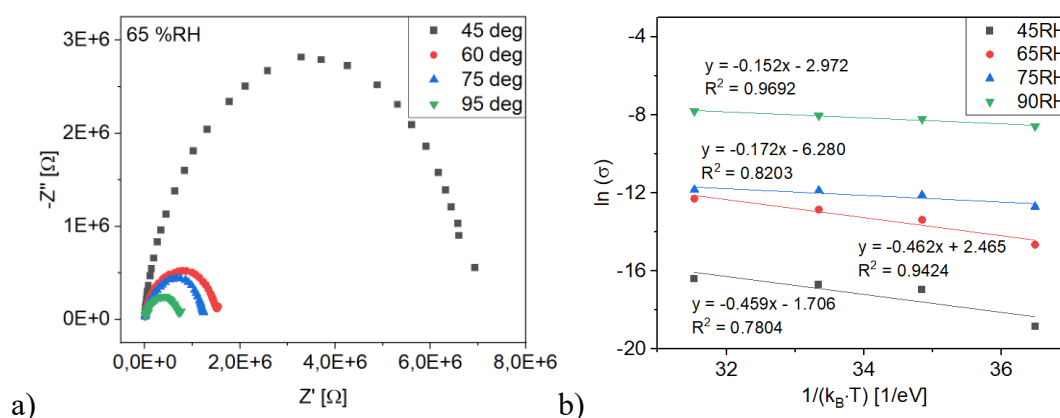
Niniejsza praca powstała dzięki wsparciu finansowemu Narodowego Centrum Nauki w ramach grantu Sonata BIS nr 2022/46/E/ST4/0039. Pomiary NMR były możliwe dzięki wsparciu organizacji PANACEA, która otrzymała środki w ramach programu Horyzont Europa 2020, grant nr 101008500.

Przewodnictwo heteroaromatycznych związków typu HOF na bazie kwasów difosfonowych

Patrycja Kądziałka, Tomasz K. Olszewski, Tomasz Misiaszek.

Katedra Chemii Fizycznej i Kwantowej, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław. email: tomasz.olszewski@pwr.edu.pl

Szkielety organiczne z wiązaniem wodorowym (HOF, ang. *Hydrogen-bonded Organic Frameworks*) stanowią ekologiczną alternatywę dla MOFów (ang. *Metal Organic Frameworks*). Materiały te wykazują obiecujące przewodnictwo protonowe i mogą być alternatywą dla drogiego Nafionu w membranach PEM (ang. *Proton Exchange Membranes*) [1,2]. Najpopularniejsze tektyny dla HOFów są oparte na kwasach karboksylowych lub sulfonowych, podczas gdy w literaturze brakuje opisanych struktur szkieletów organicznych opartych na kwasach difosfonowych [3]. Zsyntetyzowano heteroaromatyczne kwasy difosfonowe, które dzięki dodatkowej grupie hydroksylowej tworzyły atrakcyjne wiązania wodorowe, umożliwiając wydajny transport protonów. Przewodności protonów mierzono w zmiennych temperaturach: 45-95 °C i przy zmiennej wilgotności względnej: 45-90 % (rys. 1a) oraz dodatkowo w 97 % wilgotności względnej.



Rys.1. a) Przykładowy wykres Nyquista przy względnej wilgotności 65 % oraz w zmiennej temperaturze: 45 °C, 60 °C, 75 °C i 95 °C, b) Energie aktywacji dla zmiennej wilgotności względnej

Na podstawie wyników obliczono wartości przewodnictwa protonowego i energie aktywacji. Najważniejszym czynnikiem wpływającym na efektywność transportu protonów jest układ wiązań wodorowych w strukturze materiału. Jakość przewodnictwa poprawia się wraz ze wzrostem wilgotności a cząsteczki wody pomagają tworzyć bardziej efektywne ścieżki dla przewodnictwa protonowego. Na przykład dla kwasu 2,5-pirydynodifosfonowego wartości przewodnictwa protonowego w temperaturze 95 °C wynosiły $7,62 \cdot 10^{-8}$ S/cm przy 45% RH i osiągnęły $4,10 \cdot 10^{-4}$ S/cm przy 90% RH. Pomiar przeprowadzony w temperaturze pokojowej i przy 97 % RH wykazał wysoką przewodność, wynoszącą $1,88 \cdot 10^{-3}$ S/cm, co stanowi bardzo obiecujący wynik w kontekście organicznych materiałów przewodzących protony. Najniższa energia aktywacji określona dla 90% wilgotności wynosiła 0,15 eV (rys. 1b).

1. L. Chen, B. Zhang, L. Chen, H. Liu, Y. Hu, S. Qiao, *Materials Advances*, 2022, 3, 3680-3708
2. T. Pramanik, A. Anand, A. Pandikassala, R. Illathvalappil, S. Kurungot, *Chemical Communications*, 2022, 58(40), 5972-5975
3. M. Chafiq, A. Chaoui, Y. G. Ko, *Nanomicro Lett.* 2023, 15(1), 213



S01 P13

Modyfikacja związków antymitotycznych podstawnikami metalocenowymi jako strategia projektowania związków wielocelowych

Damian Plażuk¹, Andrzej Błaż², Błażej Rychlik²

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

²Uniwersytet Łódzki, Wydział Biologii i Ochrony Środowiska, Centrum Biologii Cyfrowej i Nauk Biomedycznych - Biobank Łódź, ul. Pomorska 141/143, 90-236 Łódź

adres korespondencyjny: Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej, ul. Tamka 12, 91-403 Łódź

e-mail: damian.plazuk@chemia.uni.lodz.pl

Związki zaburzające dynamikę mikrotubul stanowią ważną grupę leków przeciwnowotworowych, jednak ich zastosowanie ograniczają działania niepożądane oraz rozwój oporności wielolekowej [1]. Jednym z kierunków poszukiwania nowych substancji przeciwnowotworowych jest projektowanie związków wielocelowych zdolnych do równoczesnego oddziaływania z kilkoma celami molekularnymi [2]. Interesującą strategią jest modyfikacja znanych farmakoforów fragmentami metalocenowymi, które mogą zmieniać ich właściwości fizykochemiczne, sposób oddziaływania z białkami oraz profil aktywności biologicznej. Wykazaliśmy, że ferrocenyłowaty analog etopozylu hamuje zarówno topoizomerazę II, jak i polimeryzację tubuliny [3]. W ramach obecnych badań zaprojektowaliśmy i otrzymaliśmy serię metalocenyłowych pochodnych wybranych niskocząsteczkowych związków antymitotycznych. Przedstawione zostaną strategie syntetyczne oraz wyniki badań nad wpływem modyfikacji strukturalnych na aktywność antyproliferacyjną otrzymanych związków.

Podziękowania: Badania finansowane z projektu NCN (UMO-2024/53/B/NZ7/04162).

Literatura

[1] R. Kaul, A. L. Risinger, S. L. Mooberry, „Microtubule-Targeting Drugs: More than Antimitotics”, *J. Nat. Prod.* 2019, 82, 680-685

[2] K. E. Arnst, S. Banerjee, H. Chen, S. Deng, D.-J. Hwang, W. Li, D. D. Miller, „Current Advances of Tubulin Inhibitors as Dual Acting Small Molecules for Cancer Therapy”, *Med. Res. Rev.* 2019, 39, 1398-1426

[3] K. Chrabąszcz, A. Błaż, M. Gruchała, M. Wachulec, B. Rychlik, D. Plażuk, „Synthesis and Biological Activity of Ferrocenyl and Ruthenocenyl Analogues of Etoposide: Discovery of a Novel Dual Inhibitor of Topoisomerase II Activity and Tubulin Polymerization”, *Chem. Eur. J.* 2021, 27, 6254-6262

Nowoczesne strategie syntezy biokoniugatów steroidowych z wykorzystaniem chemii „click”

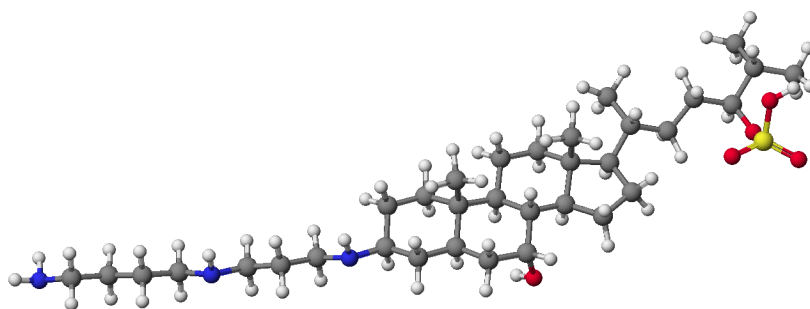
Tomasz Pospieszny, Anna Kawka, Hanna Koenig

*Zakład Produktów Bioaktywnych, Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu;
 ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;
 tposp@amu.edu.pl*

Naturalne związki steroidowe stanowią istotną klasę szkieletów molekularnych wykorzystywanych w syntezie organicznej, charakteryzujących się sztywną strukturą, określoną stereochemią oraz korzystnymi właściwościami fizykochemicznymi. Inspirując się biologicznie aktywnymi aminosterolami, takimi jak skwalamina, w ostatnich latach prowadzone są liczne badania nad otrzymywaniem strukturalnie zróżnicowanych biokoniugatów steroidowych o potencjalnym znaczeniu terapeutycznym [1].

Przedstawiono zastosowanie chemii „click”, w szczególności katalizowanej miedzią 1,3-dipolarnej cykloaddycji, jako uniwersalnej i efektywnej strategii otrzymywania koniugatów pochodnych steroidów. Opracowano różnorodne ścieżki syntezy prowadzące do otrzymania dimerów steroidowych, quasi-podandów oraz układów hybrydowych opartych na szkielecie kwasów żółciowych i β -steroli [2–3]. Wprowadzenie łączników 1,2,3-triazolowych umożliwiło efektywne, modułowe łączenie poszczególnych fragmentów, zapewniając jednocześnie dodatkową funkcjonalność oraz zwiększoną elastyczność konformacyjną otrzymywanych układów.

Wszystkie otrzymane związki zostały w pełni scharakteryzowane z wykorzystaniem metod spektroskopowych, w tym ^1H i ^{13}C NMR, spektroskopii FT-IR oraz spektrometrii masowej. Zróżnicowanie strukturalne otrzymanych koniugatów przekłada się na szeroki zakres ich właściwości fizykochemicznych oraz wyraźną skłonność do tworzenia oddziaływań supramolekularnych. Wstępne badania *in silico* wskazują, że wybrane układy mogą wykazywać zdolność oddziaływania z biologicznie istotnymi celami molekularnymi, co podkreśla ich potencjał jako platformy do dalszych badań w obszarze chemii medycznej.



Rysunek 1. Model molekularny skwalaminy.

References:

- [1] Pospieszny, T. *Mini-Rev. Org. Chem.* **2015**, 12, 258-270.
- [2] Kawka, A., Hajdaś, G., Koenig, H., Kułaga, D., Kowalczyk, I., Pospieszny, T. *J. Mol. Struct.* **2023**, 1273, 134313.
- [3] Kawka, A., Nowak, D., Koenig, H., Pospieszny, T. *J. Org. Chem.* **2024**, 89 (11), 7561-7572.
- [4] Kawka, A., Koenig, H., Wysocka, J., Jastrzębska, I., Pospieszny, T. *J. Mol. Struct.* **2026**, 1368, 146279.

Biokoniugaty steroid–hekogenina otrzymywane metodą „click” – synteza, charakterystyka i potencjał biologiczny

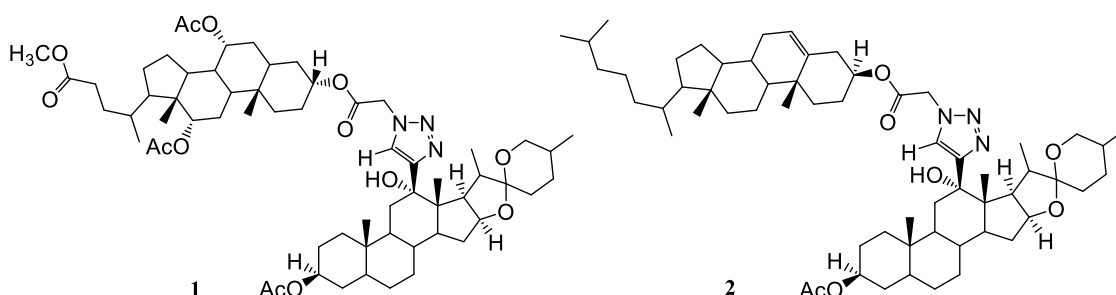
Tomasz Pospieszny¹, Anna Kawka¹, Hanna Koenig¹, Joanna Wysocka², Izabella Jastrzębska²

¹*Zakład Produktów Bioaktywnych, Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu;
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61–614 Poznań;*

²*Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku; ul. Ciołkowskiego 1 K, Białystok 15-245;
tposp@amu.edu.pl*

Steroidy, w tym kwasy żółciowe i sterole, stanowią cenne szkielety molekularne wykorzystywane w projektowaniu nowych związków o potencjalnym zastosowaniu biologicznym i farmakologicznym. Ich połączenie z innymi bioaktywnymi strukturami pozwala uzyskać układy o potencjalnie wielokierunkowym działaniu. Szczególnie interesującym podejściem jest wykorzystanie chemii „click”, umożliwiającej efektywne i modułowe łączenie różnych fragmentów steroidowych za pomocą stabilnego pierścienia 1,2,3-triazolowego [1–3].

Opracowano strategię syntezy nowych hybryd steroid–hekogenina z wykorzystaniem katalizowanej przez miedź cykloaddycji azydkowo-alkinowej (CuAAC). Pochodne kwasów żółciowych oraz steroli sprzęgano z 12 α - i 12 β -alkinyłowymi pochodnymi hekogeniny. Otrzymano serię dziesięciu nowych biokoniugatów steroidowych. Struktury wszystkich otrzymanych związków potwierdzono z wykorzystaniem spektroskopii ¹H NMR i ¹³C NMR, spektroskopii FT-IR oraz spektrometrii mas ESI-MS. Dodatkowo przeprowadzono obliczenia semiempiryczne PM5, które wykazały zależność stabilności termodynamicznej otrzymanych koniugatów od rodzaju zastosowanego szkieletu steroidowego oraz stopnia podstawienia grup hydroksylowych. Pierścień 1,2,3-triazolowy również wpływał na sztywność strukturalną oraz zdolność otrzymanych hybryd do tworzenia oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych. Badania *in silico* z wykorzystaniem programu PASS potwierdziły, że otrzymane profile aktywności wskazują na możliwość wielokierunkowego działania biologicznego, obejmującego m.in. aktywność hipolipemiczną oraz związaną z indukcją apoptozy [4]. Wyniki te wskazują, że hybrydy steroid–hekogenina stanowią interesującą platformę do projektowania nowych związków o potencjalnym zastosowaniu terapeutycznym.



Rysunek 1. Koniugaty kwasu cholowego (1) i cholesterolu (2) z hekogeniną.

References:

- [5] Kawka, A., Koenig, H., Pospieszny, T. *Bioorg. Chem.* **2024**, 153, 107933.
- [6] Kawka, A., Nowak, D., Koenig, H., Pospieszny, T. *J. Org. Chem.* **2024**, 89 (11), 7561-7572.
- [7] Hajdaś, G., Kawka, A., Kułaga, D., Koenig, H., Sosnowska, K., Mrówczyńska, L., Pospieszny, T. *Steroids* **2023**, 109, 109282.
- [8] Kawka, A., Koenig, H., Wysocka, J., Jastrzębska, I., Pospieszny, T. *J. Mol. Struct.* **2026**, 1368, 146279.

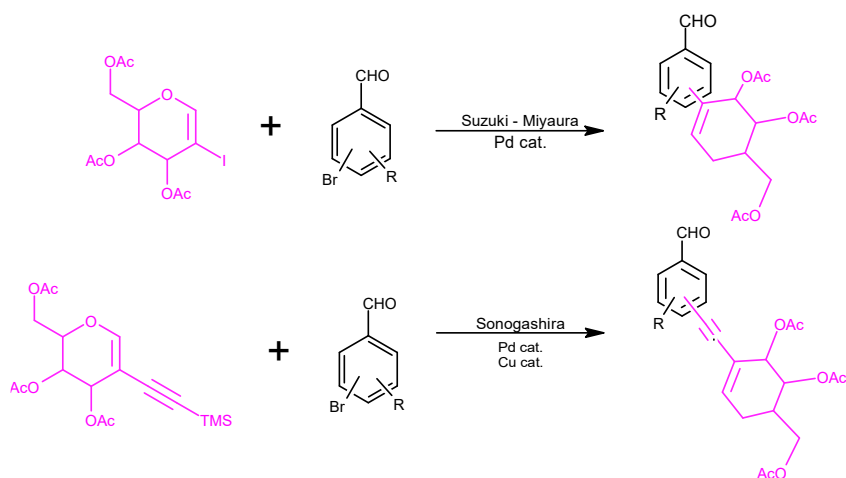
Badania nad glikozylacją aldehydów aromatycznych z wykorzystaniem sprzęgania Suzukiego-Miyaury oraz reakcji Sonogashiry

Magdalena Puła, Dariusz Baran, Maciej Malinowski

Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej, Stanisława Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa,
magdalena.pula.studp@pw.edu.pl

W terapii fotodynamicznej (PDT) wykorzystywane są fotouczulacze, czyli związki wykazujące zdolność generowania reaktywnych form tlenu (ROS) pod wpływem naświetlania, które powodują obumieranie tkanek nowotworowych. Glikoporfiryny są interesującą klasą fotouczulaczy, gdyż ich właściwości zdecydowanie lepiej spełniają biologiczne wymagania terapii fotodynamicznej. Niemniej jednak, brakuje uniwersalnej metody syntezy tej klasy fotouczulaczy. Obiecującym rozwiązaniem może stać się synteza opierająca się na glikozyłowanych aldehydach aromatycznych - mało rozpoznanych dotychczas blokach budulcowych. W ramach niniejszych badań przedstawione zostaną wyniki eksperymentów nad wykorzystaniem sprzęgania Suzukiego-Miyaury¹ oraz reakcji Sonogashiry² prowadzące do glikozyłowanych aldehydów.

Wymienione reakcje umożliwiają syntezę glikokoniugatów (Schemat 1.) o obiecujących parametrach biologicznych do zastosowania w fototerapiach.



Schemat 1. Synteza glikozyłowanych aldehydów aromatycznych.

Ze względu na obszerny zasób cukrów potencjalnie wpływających na efekt biologiczny w fototerapii, wykonałam szereg badań w celu znalezienia odpowiedniej ścieżki syntetycznej, która wykaże się największą uniwersalnością dla różnych pochodnych aldehydów aromatycznych.

W ramach przeprowadzonych badań otrzymałam szereg glikozyłowanych aldehydów aromatycznych o niespotykanej złożoności opartej o strukturę mono, di oraz trisacharydów.

- Godlewski, B., Malinowski, M. Suzuki-Miyaura Reaction of Glycals with Base-Labile Protecting Groups as a New Route to Glycoporphyrins. *Adv. Synth. Catal.* **2024**, 366 (13)
- Godlewski, B., Baran, D., de Robichon, M., Ferry, A., Ostrowski, S., Malinowski, M. Sonogashira Cross-Coupling as a Key Step in the Synthesis of New Glycoporphyrins. *Org. Chem. Front.* **2022**, 9 (9)

Praca została wykonana w ramach projektu NCN Sonata 19 (2023/51/D/ST5/00384):
Metaloorganiczny mariaż cukrów z porfirynami. Ku nowym fotouczulaczom.

Synthesis of new ligands based on squaric acid

Julia Szymańska^{1,2}, Adam Marek Pieczonka¹, Michał Rachwański¹

¹University of Lodz, Faculty of Chemistry, Department of Organic and Applied Chemistry,
Tamka 12, 91-403 Lodz

²University of Lodz, Doctoral School of Exact and Natural Sciences,
Matejki 21/23, 90-237 Lodz
julia.szymanska@edu.uni.lodz.pl

Squaric acid and its derivatives constitute an interesting group of organic compounds due to their characteristic structural properties, susceptibility to functionalization, and ability to form complexes with metal ions [1,2]. Particular attention has been paid to ligands based on the squaric acid scaffold, which, owing to the presence of oxygen atoms and, in appropriately functionalized derivatives, additional donor groups, may exhibit diverse coordination properties [1]. The introduction of an amide moiety into their structure enhances the molecule's ability to form strong and directional hydrogen bonds and also influences its electronic properties [2,3]. In turn, the hydrazone moiety, which contains donor nitrogen atoms and represents a Schiff base derivative, may serve as an effective coordination site for metal ions [4].

The aim of the project is to synthesize new unsymmetrical ligands based on the squaric acid scaffold that contain both an amide moiety and a Schiff base fragment (Fig. 1). It is assumed that the combination of these structural elements will enable the preparation of ligands exhibiting interesting coordination properties toward metal ions. The resulting complexes may find application as catalysts in cross-coupling reactions, including the Kumada coupling reaction. Furthermore, the developed synthetic strategy will enable the incorporation of chiral amine fragments into the ligand structure, thus creating the possibility of their potential application in asymmetric catalysis.

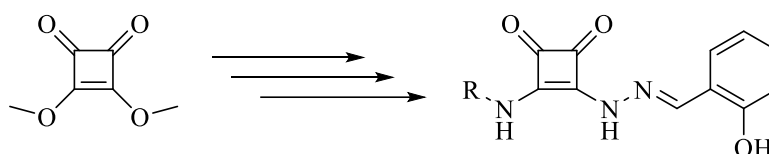


Fig. 1. General synthesis of the target ligands.

- [1] N. K. Ruseva, E. D. Cherneva, A. G. Bakalova, *Arkivoc* 2022, part i, 285-303.
- [2] R. I. Storer, C. Aciro, L. H. Jones, *Chem. Soc. Rev.* 2011, 40, 2330-2346.
- [3] L. A. Marchetti, L. K. Kumawat, N. Mao, J. C. Stephens, R. B. P. Elmes, *Chem.* 2019, 5, 1398-1485.
- [4] H. Kargar, M. Fallah-Mehrjardi, K. S. Munawar, *Coord. Chem. Rev.* 2024, 501, 215587.

Regioselective nucleophilic ring opening of aziridines in the synthesis of chiral biologically important building blocks

Julia Szymańska^{1,2}, Adam Marek Pieczonka¹, Michał Rachwański¹

¹University of Lodz, Faculty of Chemistry, Department of Organic and Applied Chemistry, Tamka 12, 91-403 Lodz

²University of Lodz, Doctoral School of Exact and Natural Sciences, Matejki 21/23, 90-237 Lodz

julia.szymanska@edu.uni.lodz.pl

Aziridine ring-opening reactions play an important role in the synthesis of biologically active nitrogen-containing compounds. Aziridines are valuable synthetic intermediates because the presence of a strained three-membered ring enables its opening by various nucleophiles, leading to a broad range of functionalized derivatives belonging to different classes of compounds [1]. The preparation of chiral, optically pure compounds with a defined absolute configuration and potential biological activity is a demanding and complex process. Compounds containing a 1,2,3-triazole ring are of particular interest due to their biological properties, including antimicrobial, antiviral, and anticancer activities [2]. Moreover, the triazole ring plays an important role in medicinal chemistry because of its unique structural properties, synthetic versatility, and pharmacological potential [3].

The aim of the project was to apply the developed methodology to the synthesis of new compounds with potential biological activity, including aziridine analogues of known therapeutic agents (Fig. 1), such as atenolol, rasagiline, and erlotinib, as well as their derivatives containing a 1,2,3-triazole ring. A method for introducing luminescent moieties into selected synthesized derivatives was also developed, enabling the preparation of fluorescently labelled drug analogues.

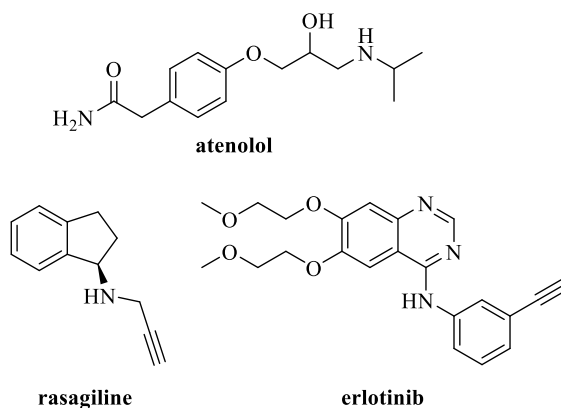


Fig. 1. Structures of selected pharmaceuticals.

[1] S. Sabir, G. Kumar, V. P. Verma, J. L. Jat, ChemistrySelect, 2018, 3, 3702-3711.

[2] E. Bonadi, M. S. Christodoulou, G. Fumagalli, D. Perdicchia, G. Rastelli, D. Passarella, Drug Discov. Today 2017, 22, 1572-1581.

[3] D. Lengerli, K. Ibis, Y. Nural, E. Banoglu, Expert Opin. Drug Discov. 2022, 17, 1209-1236.

Unique emission behavior of newly discovered polymorphs of coumarin derivatives

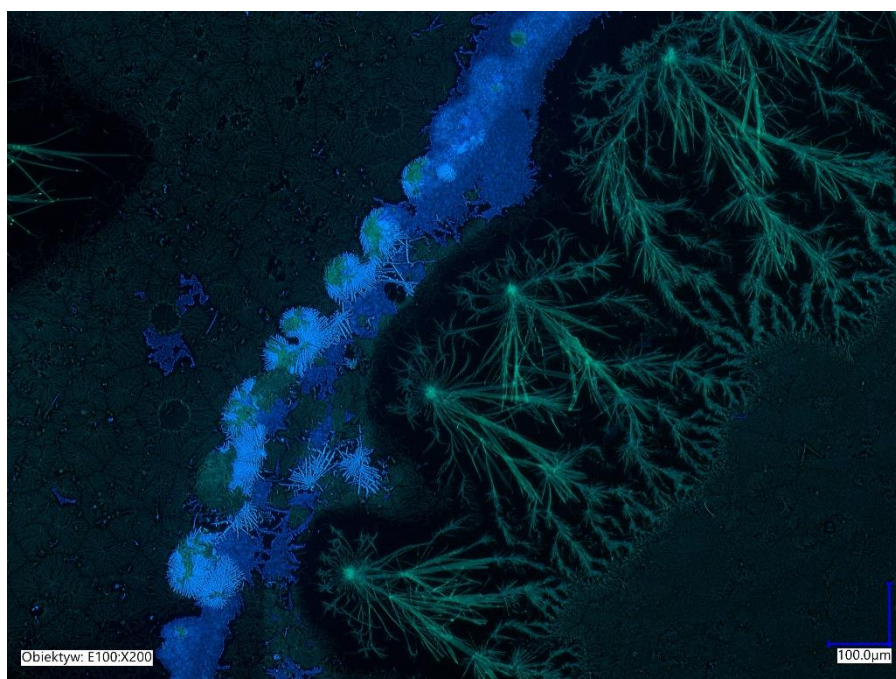
Eliza Świąteczak^{1,2}, Michał Rachwański¹, Adam Marek Pieczonka¹

¹University of Lodz, Faculty of Chemistry, Department of Organic and Applied Chemistry, Tamka 12, 91-403 Lodz

²University of Lodz, Doctoral School of Exact and Natural Sciences, Matejki 21/23, 90-237 Lodz
 e-mail: eliza.swietczak@edu.uni.lodz.pl

The aim of this study was to synthesize luminescent coumarin derivatives with high solid-state quantum yield, making them suitable for application as emissive layers in organic light-emitting diodes (OLEDs). During the course of the research, the phenomenon of polymorphism was unexpectedly observed. This phenomenon is closely related to the molecular packing within the material. In this work, particular attention was devoted to crystalline polymorphism, defined as the ability of a compound to crystallize in more than one distinct crystal structure [1].

Despite the growing interest in luminescent polymorphism, the behavior of such materials in thin solid films used in optoelectronic devices remains insufficiently understood [2,3]. The observations indicate that the molecular arrangement in thin films may differ significantly from that found in bulk crystals. Consequently, thin-film fabrication processes may promote the formation of novel polymorphic forms that cannot be obtained using conventional crystallization methods [3,4]. Therefore, coumarin derivatives represent a promising and attractive subject for further investigation.



Photograph of a thin solid film of the selected compound.

- [1] A. A. Dar, A. A. Malik, *J. Mater. Chem. C* 12 (2024) 9888.
- [2] D. Tchoń, A. Wrona-Piotrowicz, D. Trzybiński, A. Makal, *CrystEngComm*. 21 (2019) 5845.
- [3] Y. Hirai, *ACS Appl. Opt. Mater.* 2 (2024) 1025.
- [4] Y. Song, G. Pan, C. Zhang, C. Wang, B. Xu, W. Tian, *Mater. Chem. Front.* 7 (2023) 5104-5119.

Preparation and characterization of luminescent coumarin-based compounds

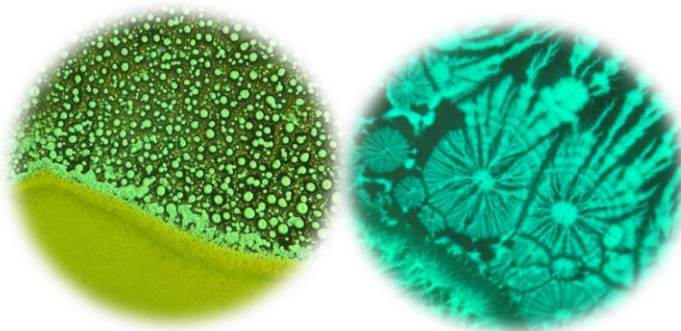
Eliza Świętczak^{1,2}, Michał Rachwalski¹, Adam Marek Pieczonka¹

¹University of Lodz, Faculty of Chemistry, Department of Organic and Applied Chemistry,
 Tamka 12, 91-403 Lodz

²University of Lodz, Doctoral School of Exact and Natural Sciences, Matejki 21/23, 90-237 Lodz
 e-mail: eliza.swietczak@edu.uni.lodz.pl

Coumarins represent a large group of heterocyclic compounds. Their fundamental structural unit is the 2H-chromen-2-one framework, consisting of a benzene ring fused with an α -pyrone ring. These compounds occur naturally in many plant species and can also be obtained through chemical synthesis. Natural coumarins perform several important biological functions in plants, including participation in defense mechanisms against pathogens, insects, and herbivores, as well as involvement in the regulation of plant growth and development processes [1]. The significant interest in coumarins results from the possibility of facile modification of their chemical structure. As a result, coumarin derivatives are considered among the most versatile organic fluorophores. Due to their favorable optical properties, coumarin derivatives have found applications as fluorescent dyes, chemical and biological probes, cell imaging markers, active materials in dye lasers, and components of optical sensors. Increasing attention is also being devoted to the use of coumarin derivatives as functional materials in organic light-emitting diodes (OLEDs), photovoltaic cells, and other optoelectronic devices [2].

The aim of my work is the synthesis of luminescent coumarin derivatives using modern synthesis methods. I strive to ensure that the obtained products exhibit Aggregation-Induced Emission (AIE) properties [3]. An integral part of this work is the fabrication of thin solid-state films, initially using the drop-casting method. It is important to obtain thin, uniform films with luminescent properties.



Photograph of a thin solid film of the selected compounds

[1] Bourgaud, F.; Hehn, A.; Larbat, R.; et al. *Phytochem. Rev.* 2006, 5, 293–308.

[2] Alotaibi, M.A.; Alharthi, A.I.; Qahtan, T.F.; Alotibi, S.; Alansi, A.M.; Bakht, M.A. *Nanomaterials* 2023, 13, 3001.

[3]. J. A. Adamczyk, L. Marciniak, M. Rachwalski, A. M. Pieczonka, *Monografia Kwadrans dla chemii*, 2020, 13.

Synteza demissydyny, jej stereoizomerów oraz analogów ze steroidowych sapogenin

Aneta Baj,^a Juan Rivas-Loaiza,^a Nirawit Kaewnok,^b Magdalena Szymańska,^a Yliana López,^c Stanisław Witkowski,^a Agnieszka Wojtkielewicz,^a Jacek Witold Morzycki^a

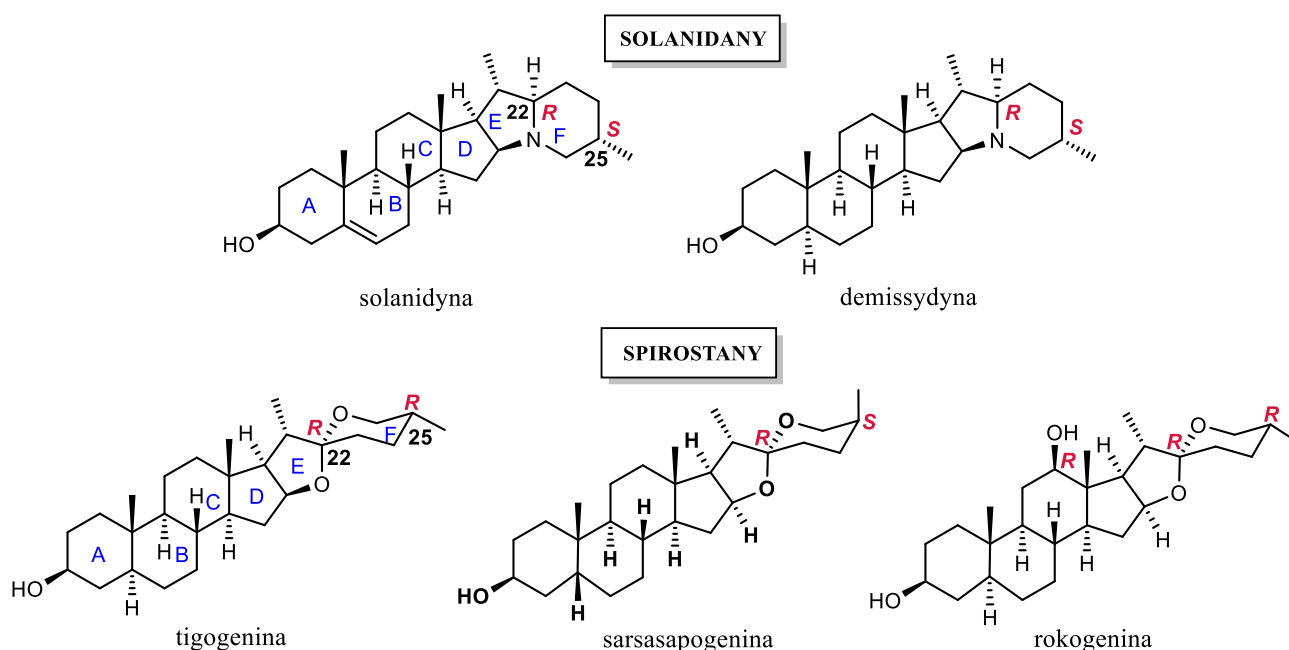
^a Uniwersytet w Białymstoku, Wydział Chemii, ul. K. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok

^b Department of Chemistry, Faculty of Science, Silpakorn University, 73000 Nakhon Pathom, Thailand

^c Instituto de Investigaciones Químico Biológicas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán 58030,

aneta.baj@uwb.edu.pl

Alkaloidy solanidanowe, takie jak solanidyna i demissydyna (Rys. 1), stanowią ważną grupę naturalnych związków steroidowych występujących głównie w roślinach psiankowatych (Solanaceae). Wykazują one szeroką aktywność biologiczną, w tym działanie przeciwnowotworowe, przeciwprwotniakowe, przeciwbakteryjne i przeciwzapalne. Znane syntezy tych związków były często wieloetapowe i mało wydajne [1]. Niniejsza praca przedstawia wyniki badań nad opracowaniem wydajnej i efektywnej metody syntezy demissydyny oraz jej stereoizomerów i analogów, wychodząc z sapogenin spirostanowych – tigogeniny, sarsasapogeniny i rokogeniny (Rys. 1) [2, 3].



Rysunek 1. Struktury chemiczne przykładowych alkaloidów solanidanowych (solanidanów) oraz sapogenin spirostanowych (spirostanów).

[1] Z.-D. Zhang, Y. Shi, J.-J. Wu, J.-R. Lin, W.-S. Tian, *Org. Lett.* **2016**, 18, 3038-3040.

[2] J. A. Rivas-Loaiza, A. Baj, Y. López, S. Witkowski, A. Wojtkielewicz, J. W. Morzycki, *J. Org. Chem.* **2021**, 86, 1575.

[3] A. Baj, N. Kaewnok, J. A. Rivas-Loaiza, M. Szymańska, S. Witkowski, A. Wojtkielewicz, J. W. Morzycki, *Chem. Eur. J.* **2023**, 29, e202203314.



S01 P22

1,2,4,5-Tetraoksany jako uprzywilejowany motyw strukturalny w projektowaniu nowych związków biologicznie aktywnych

Filip Wrotecki, Adam Huczyński

Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań
filwro1@st.amu.edu.pl

Znaczącą zaletą syntetycznych związków zawierających ugrupowanie endonadtlenkowe, takich jak 1,2,4-trioksolany i 1,2,4,5-tetraoksany, jest stosunkowo łatwa dostępność syntetyczna, wysoka aktywność przeciwmalaryczna oraz możliwość otrzymywania chemicznie zróżnicowanych bibliotek analogów, co umożliwia bardziej precyzyjny dobór potencjalnych związków wiodących. Wykazano, że 1,2,4,5-tetraoksany charakteryzują się wysoką aktywnością przeciwmalaryczną *in vitro*, a ich mechanizm działania jest zbliżony do mechanizmu naturalnych endonadtlenków, takich jak artemizyna oraz artezumat [1].

Pomimo opracowania wielu metod syntezy pierścienia 1,2,4,5-tetraoksanowego, osiągnięto jedynie ograniczony sukces w otrzymywaniu związków odznaczających się jednocześnie wysoką trwałością oraz dobrą biodostępnością.

Celem naszych badań było opracowanie bardziej trwałych, niesymetrycznych 1,2,4,5-tetraoksanów zawierających grupy funkcyjne umożliwiające dalsze sprzęganie ze związkami pochodzenia naturalnego. Kluczowym etapem opracowanej strategii syntetycznej było zastosowanie m.in. reakcji redukcyjnego aminowania.

Nasze badania wykazały, że synteza 1,2,4,5-tetraoksanów zależy od wielu czynników, takich jak budowa ketonu, temperatura, zastosowany rozpuszczalnik, wartość pH, rodzaj katalizatora, stężenie substratów oraz równowagi ustalające się pomiędzy związkiem karbonylowym a prekursorami nadtlenków cyklicznych. Czynniki te w istotny sposób wpływają na wydajność procesu i wymagają starannej optymalizacji w celu skutecznego otrzymywania nowych funkcjonalizowanych pochodnych 1,2,4,5-tetraoksanów przeznaczonych do dalszych modyfikacji chemicznych.

Badania finansowano z projektu "Inicjatywa Doskonałości - Uczelnia Badawcza" (200/39/UAM/0011).

1. R. Amewu, *et al.* Org. Biomol. Chem. 2006; 4 (24): 4431–4436.



S01 P23

Mechanochemiczne podejście do syntezy, cyklizacji peptydów oraz otrzymywania koniugatów porfirynowo-peptydowych

Justyna Zajac, Ewelina Wielgus, Aneta Wróblewska, Piotr Paluch, Sławomir Kaźmierski, Irena Bąk-Sypień, Marek J. Potrzebowski

Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN w Łodzi
justyna.zajac@cbmm.lodz.pl

Mechanochemia jest dynamicznie rozwijającą się gałęzią syntezy organicznej, zgodną z założeniami zielonej chemii dzięki ograniczeniu zużycia rozpuszczalników i energii. W pracy przedstawiono zastosowanie mechanochemii do syntezy liniowych i cyklicznych peptydów oraz syntezy koniugatów porfirynowo-peptydowych. Reakcje prowadzono w młynie kulowym, co umożliwiło znaczne skrócenie czasu syntezy, ograniczenie ilości odpadów oraz uzyskanie wysokiej powtarzalności procesu.

Mechanochemiczną syntezę peptydów oparto na strategii „klocków konstrukcyjnych”, polegającej na łączeniu krótkich fragmentów peptydowych w bardziej złożone oligopeptydy. Podejście to zastosowano do syntezy di-, tri-, tetra-, penta-, hekso-, hepta- i oktapeptydów. Istotnym elementem badań była również mechanochemiczna cyklizacja wybranych tetrapeptydów. Cykliczne peptydy wykazują zwiększoną stabilność oraz korzystniejsze właściwości farmakologiczne, co czyni je obiecującymi kandydatami do zastosowań medycznych.

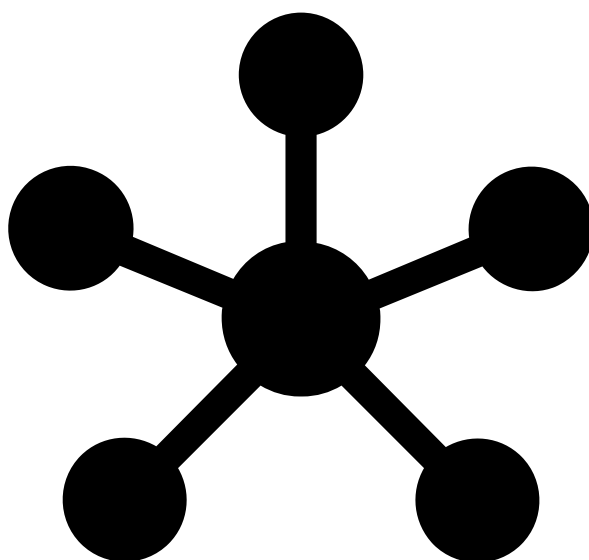
Otrzymane liniowe peptydy wykorzystano następnie do syntezy koniugatów porfirynowo-peptydowych, stanowiących interesującą grupę związków o potencjalnym zastosowaniu w terapii fotodynamicznej, diagnostyce i chemii materiałowej. Wprowadzenie fragmentów peptydowych do struktury porfiryny umożliwia modulację jej właściwości amfifilowych, wpływając na oddziaływanie z błonami biologicznymi oraz stwarzając możliwości dalszej funkcjonalizacji i biokoniugacji.

Uzyskane wyniki potwierdzają potencjał mechanochemii jako wydajnej, powtarzalnej i przyjaznej środowisku metody syntezy funkcjonalnych peptydów oraz koniugatów peptydowo-porfirynowych o znaczeniu dla chemii materiałowej i biomedycyny.



S02

Chemia nieorganiczna, koordynacyjna i kataliza





Wykłady sekcyjne



S02 WS01

Fotokrystalografia jako narzędzie do monitorowania indukowanych światłem procesów zachodzących w fazie stałej na przykładzie kryształów związków koordynacyjnych

Katarzyna N. Jarzemska^a, Radosław Kamiński^a, Piotr Łaski^a,
Vishnu Vijayakumar-Syamala^a, Kinga Potempa^a,
Krystyna A. Deresz^a, Alice Brink^b oraz Andreas Roodt^b

^aUniwersytet Warszawski, Warszawa

^bUniversity of the Free State, Bloemfontein, Republika Południowej Afryki

e-mail: katarzyna.jarzemska@uw.edu.pl

Fotokrystalografia to zbiór technik łączących krystalografię ze spektroskopią, wykorzystywanych do badania zmian strukturalnych wywołanych światłem i dynamiki procesów towarzyszących wzbudzeniu w próbkach w fazie stałej (monokryształy, nanokryształy, cienkie warstwy). Wyróżnia się fotokrystalografię statyczną, do badania stanów metastabilnych czy trwałych produktów przemian, oraz czasowo-rozdzielczą, pozwalającą na śledzenie (ultra)szybkich, nawet sub-pikosekundowych, procesów. Eksperymenty metodą fotokrystalografii statycznej można z sukcesem prowadzić w laboratorium domowym, natomiast szybsze zjawiska bada się najczęściej z użyciem źródeł synchrotronowych oraz laserów na swobodnych elektronach (XFEL).

W ramach wykładu przedstawione zostanie w pierwszej kolejności zastosowanie fotokrystalografii statycznej do monitorowania procesów indukowanych światłem na przykładzie modelowych, fotoaktywnych związków koordynacyjnych. Omówiona zostanie izomeria wiązaniowa w fotoprzełącznikach azotynowych o centrach Ni, Cu i Co [1-3] – ligand azotynowy zmienia sposób koordynacji do metalu pod wpływem impulsu światła, a powstałe izomery są zazwyczaj trwałe w niższych temperaturach.

Procesy indukowane optycznie mogą jednak zachodzić w czasie krótszym niż kilka pikosekund, a produkty mogą być nietrwałe. W tej sytuacji konieczne jest zastosowanie metod czasowo-rozdzielczych. Przedstawione zostaną tu zatem także obecne możliwości pomiarowe i wyzwania fotokrystalografii w badaniach krótko żyjących stanów wzbudzonych w kryształach przykładowych kompleksów metali przejściowych [4,5]. Tego typu analizy pogłębiają rozumienie procesów elektronowych oraz towarzyszących im zmian strukturalnych i właściwości materiałów – co ma znaczenie zarówno poznawcze, jak i aplikacyjne, w kontekście projektowania nowych materiałów funkcjonalnych.

Badania finansowane są przez Narodowe Centrum Nauki (2020/38/E/ST4/00400, SONATA BIS oraz 2024/55/B/ST4/02582, OPUS) oraz Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego (umowa nr 2022/WK/13). Pomiary strukturalne wykonano na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, na dyfraktometrze Rigaku Oxford Diffraction SuperNova, którego zakup był współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego (POIG.02.01.00-14.122/09).

- (1) K. Potempa, K.A. Deresz, J. Jankowska, K.N. Jarzemska *et al.*, *Chem. Eur. J.* 2023, 29, e202302629.
- (2) K.A. Deresz, R. Kamiński, S.E. Kutniewska, A. Krówczyński *et al.*, *Chem. Commun.* 2022, 58, 13439.
- (3) K.A. Deresz, A. Mikhailov, J. Jankowska, L. Donà, B. Civalieri *et al.*, *ACS Omega* 2025, 10, 51940.
- (4) P. Łaski, L. Bosman, J. Drapała, R. Kamiński, D. Szarejko *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* 2024, 15, 10301.
- (5) D. Vinci, K. Ridier, F. Qi, F. Ardana-Lamas, P. Zalden, L.C. Liu *et al.*, *Nat. Commun.* 2025, 16, 2043.



S02 WS02

Supramolekularne aspekty projektowania i konstrukcji kryształów kompleksów koordynacyjnych (z ligandami cyjankowymi)

Robert Podgajny i współautorzy

Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński; ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków; robert.podgajny@uj.edu.pl

Struktura krystaliczna oraz właściwości funkcjonalne faz stałych w równym stopniu zależą od indywidualnych cech molekularnych jednostek budulcowych, jak i od sposobu ich połączenia. Zgodnie z powyższym, w obszarze chemii koordynacyjnej i supramolekularnej definiuje się odpowiednio *tektony* i *syntony supramolekularne*. W tym wystąpieniu wskazane zostaną przykłady syntonów istotnych w kształtowaniu właściwości magnetycznych, optycznych i porowatych kryształów z udziałem jednordzeniowych lub wielordzeniowych kompleksów koordynacyjnych z ligandami cyjankowymi. Szczególny nacisk zostanie położony na ciekawe, niejednokrotnie rzadko spotykane motywy oddziaływań niekowalencyjnych oraz na zastosowanie rozpoznanych wcześniej kompleksów wielordzeniowych w charakterze bloków budulcowych drugiej generacji.

Literatura:

1. J. Kobylarczyk, E. Kuzniak, M. Liberka, S. Chorazy, B. Sieklucka, R. Podgajny, *Coord. Chem. Rev.* **2020**, 419, 213394.
2. D. Głosz, A. Żabińska, M. Dyczkowska, K. Jędrzejowska, J. Kobylarczyk, M. Srebro-Hooper, James G.M. Hooper, R. Podgajny, *Coord. Chem. Rev.* **2026**, 556, 217616.
3. D. Głosz, G. Calvez, T. Eskelinen, A. Belyaev, C. Lescop, I. O. Koshevoy, R. Podgajny, *Dalton Trans.* **2026**, 55, 7142.
4. D. Głosz, A. Żabińska, J. Grzybowski, M. Srebro-Hooper, J. G. M. Hooper, B. Musielak, T. M. Muzioł, R. Podgajny, *Chem. Eur. J.* **2026**, 32, e70917.
5. D. Głosz, J. Grzybowski, A. Żabińska, M. Dyczkowska, T. M. Muzioł, M. Srebro-Hooper, R. Podgajny, *Chem. Eur. J.* **2026**, DOI: 10.1002/chem.71501



S02 WS03

Kiedy magnetyk molekularny staje się magnesem, czyli o właściwościach magnetycznych związków koordynacyjnych metali d- i f-elektronowych

Maria Korabik

*Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, ul. F. Joliot-Curie 14, 30-383 Wrocław;
maria.korabik@uwr.edu.pl*

Magnetyki molekularne to związki koordynacyjne metali d-, f-elektronowych, gdzie jon centralny z niesparowanymi elektronami na zewnętrznej powłoce połączony jest z ligandami poprzez atomy z wolnymi parami elektronowymi. Ciec krystaliczna, którą tworzą te związki może stanowić jednocentrowe i wielocentrowe (1D, 2D, 3D) układy. Właściwości magnetyczne związków koordynacyjnych zależą od samej natury jonu centralnego ale i od połączeń – rodzajów mostków, które łączą jony centralne w sieci. Analiza właściwości magnetycznych wymaga dokładnej korelacji ze strukturą krystaliczną. Nadprzewodzące interferometry kwantowe typu SQUID pozwalają na dokładną rejestrację magnesowania się próbki związku, w stałym polu magnetycznym (DC) jak i polu przemiennym (AC), w szerokim zakresie temperatur 1.8 – 300 K i pol magnetycznych do 7 Tesli.

Badania namagnesowania próbki związku i korelacja magnetyczno-strukturalna pozwalają określić właściwości magnetyczne, w tym:

- rodzaj i siłę oddziaływań magnetycznych między centrami paramagnetycznymi,
- zidentyfikować histerezę namagnesowania
- badać procesy relaksacji magnetycznej w magnesach molekularnych.

Sprzężenie ferromagnetyczne niesparowanych elektronów jonów metali, tworzących wielocentrowe struktury prowadzi do histerezy namagnesowania, co charakteryzuje związki koordynacyjne metali d-elektronowych. Anizotropia magnetyczna, szczególnie charakteryzująca związki z jonami f-elektronowymi (Dy(III), Nd(III), Yb(III)) powoduje, że związek zawierający jedno centrum magnetyczne - jon metalu, wykazuje w skali nano cechy magnesu molekularnego (*ang.* Single Molecule Magnets -SMMs). Badania ostatnich lat pokazują, że związki koordynacyjne z jonami metali, które uważane były za izotropowe magnetycznie – jony miedzi(II) czy Gd(III), też mogą przejawiać indukowane polem właściwości nanomagnesów molekularnych - powolną relaksację magnetyczną.

Podczas wykładu zostaną przedstawione przykłady badań eksperymentalnych w grupie związków koordynacyjnych zawierających jako centra jony metali d- i f-elektronowych. Wśród przykładów znajdują się związki Cu(II), Fe(III), Dy(III), Nd(III), Gd(III) Er(III), Yb(III), magnetyki molekularne (ferro- i antyferromagnetyki) oraz molekularne magnesy. Poszukiwania materiałów magnetycznych w grupie układów molekularnych trwają intensywnie a potrzebuje ich np. spintronika.



S02 WS04

Nowe związki trójskładnikowe srebra(2+), fluoru lub tlenu i innych pierwiastków

Wojciech Grochala

Uniwersytet Warszawski, Centrum Nowych Technologii

Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warszawa

w.grochala@cent.uw.edu.pl

Chemia związków srebra dwuwartościowego rozwija się współcześnie głównie z powodu ciekawych właściwości magnetycznych i elektronowych takich połączeń [1]. Szczególne nadzieje wiąże się z możliwością wygenerowania nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego w układach o odpowiednim stopniu domieszkowania [2,3]. Równocześnie rozwijana jest synteza nowych układów z tej rodziny, gdyż znanych jest ciągle jeszcze stosunkowo niewiele połączeń trój- i czteroskładnikowych. Dodatkowo, możliwość istnienia nowych faz przewidywana jest dzięki obliczeniom teoretycznym w oparciu o algorytmy uczące się, co pozwala oszczędzać czas i koszty związane z eksperymentalnymi badaniami przesiewowymi.

W niniejszym wystąpieniu skupię się na nowych przewidzianych niedawno przez teorię fazach w układach fazowych LiF/AgF_2 [4] oraz $\text{BeF}_2/\text{AgF}_2$ oraz na eksperymentalnych badaniach układów fazowych Ag-M-F ($\text{M}=\text{Pd}, \text{Pt}$) i Ag-Se-O (w analogii do znanych związków siarki [5]). Omówione zostaną proponowane przez teorię lub przetestowane w praktyce ścieżki syntezy, struktury krystaliczne oraz właściwości magnetyczne i elektronowe badanych układów.

- [1] Gawraczyński J, Kurzydłowski D, Ewings R, Bandaru S, Gadomski W, Mazej Z, Ruani G, Bergenti I, Jaroń T, Ozarowski A, Hill S, Leszczyński PJ, Tokár K, Derzsi M, Barone P, Wohlfeld K, Lorenzana J, Grochala W, Silver route to cuprate analogs, *PROC NAT ACAD SCI USA* 116(5): 1495-1500 2019
- [2] Grzelak A, Su H, Yang X, Kurzydłowski D, Lorenzana J, Grochala W, Epitaxial engineering of flat silver(II) fluoride cuprate analogs, *PHYS REV MATER* 4(8): 084405 2020
- [3] Grzelak A, Lorenzana J, Grochala W, Separation-controlled redox reactions, *ANGEW CHEM INT ED ENGL* 60(25): 13892-13895 2021
- [4] Kuder K, Grochala W, Prediction of Novel Li-AgII-F Compounds using Evolutionary Algorithms, arXiv:2512.05048
- [5] Malinowski PJ, Derzsi M, Gawel B, Łasocha W, Jagličić Z, Mazej Z, Grochala W, $\text{Ag}^{\text{II}}\text{SO}_4$: genuine sulfate of divalent silver with anomalously strong 1D antiferromagnetic interactions, *ANGEW CHEM INT ED ENGL* 49(9): 1683-1686 2010

Chemia koordynacyjna i kataliza w cieniu olbrzymów, czyli o niezwykłych własnościach soli anionów słabo koordynujących.

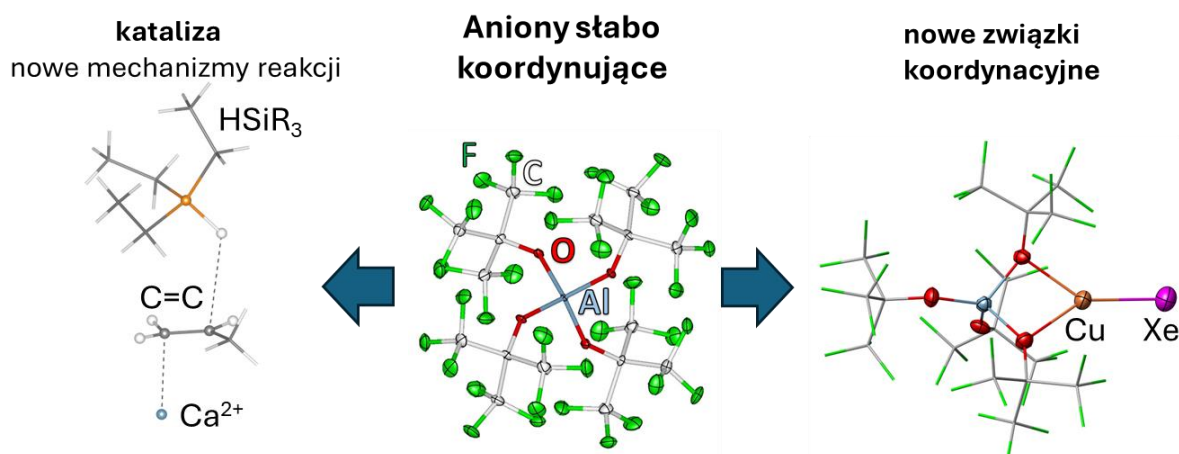
Przemysław J. Malinowski

Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski;
Ul. Banacha 2c, 02-093 Warszawa;
malin@cent.uw.edu.pl

Analiza oraz modyfikacja reaktywności kationów były i nadal są jednymi z kluczowych zadań chemii, gdyż to właśnie te indywidua odpowiadają za szereg zjawisk czy też reakcji. Istotnym czynnikiem wpływającym na ich charakter jest ich otoczenie. Okazuje się, że w środowisku o słabych własnościach donorowych, nawet proste kationy metali potrafią wykazywać osobliwe własności a do jego uzyskania niezbędne jest zastosowanie tzw. anionów słabo koordynujących (ASK). [1]

Niniejsza prezentacja przedstawia szereg związków będących solami jednych z obecnie najlepszych ASK - fluorowanych alkoksyglinianów o wzorze ogólnym $[\text{Al}(\text{OR}^{\text{F}})_4]^-$, gdzie R^{F} jest łańcuchem alkilowym o różnym stopniu fluorowania. Poruszone zostaną aspekty dotyczące nie tylko zależności własności prostych soli jakie te aniony tworzą dla różnych grup R^{F} , ale także opisane zostaną istotne reakcje organiczne jak cykloaddycje oraz hydrosililacje, które są wydajnie katalizowane przez sole prostych kationów, jak np. $\text{Ca}[\text{Al}(\text{OR}^{\text{F}})_4]_2$, niejednokrotnie na drodze unikatowej ścieżki reakcji.[2]

Ponadto, zaprezentowane zostaną związki kompleksowe zawierające nietypowe ligandy takie jak halogenowane acetonitryle, cząsteczkowy azot[3] czy także atomy gazów szlachetnych, a których stabilność jest ściśle powiązana ze słabo zasadowym (w sensie Lewisa) charakterem fluorowanych alkoksyglinianów.



Literatura

- [1] I. M. Riddlestone, A. Kraft, J. Schaefer, I. Krossing *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2018**, 57, 13982-14024.
[2] M. Grochowska-Tatarczak, K. Koterak, K. Kazimierzczuk, P. J. Malinowski *Chem. Eur. J.*, **2024**, 30, e202484502.
[3] J. Willrett, M. Schmitt, V. Zhuravlev, M. Sellin, P. J. Malinowski, I. Krossing *Angew. Chem. Int. Ed.*, 63, e202405330.

Badania strukturalne, spektroskopowe i magnetyczne nowych heterometalicznych materiałów nieorganicznych z alifatycznymi diaminami w układach Cu(II)-Ni(II), Cu(II)-Cr(III), Ni(II)-Cr(III), Cu(II)-Zn(II)

Joanna Wiśniewska,^a Natalia Tereba,^a Tadeusz Muzioł,^a Alina Bienko,^b Robert Podgajny,^c Maciej Witwicki,^b

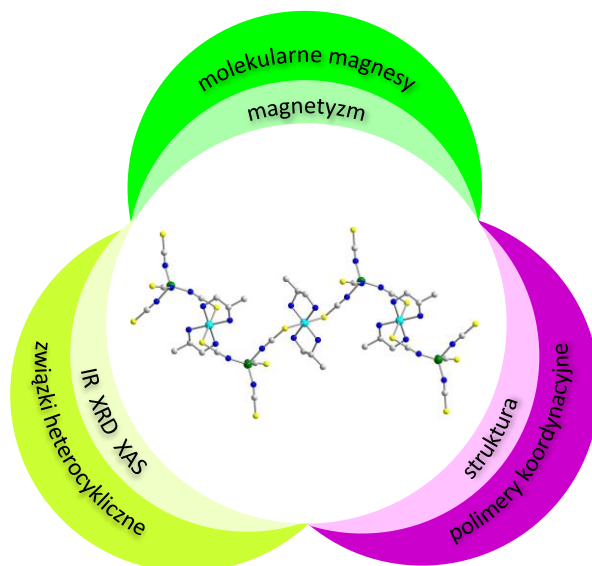
a Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika, Gagarina 7, 87-100 Toruń

b Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski, Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

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

email: wisnia@umk.pl

Badania przeprowadzone w trakcie realizacji prezentowanej pracy zostały poświęcone syntezie oraz charakterystyce strukturalnej, spektroskopowej i magnetycznej nowych heterometalicznych związków niklu(II), miedzi(II), chromu(III) i cynku(II) z alifatycznymi diaminami i jonami tiocyjanianowymi. Struktury krystaliczne, właściwości spektroskopowe i magnetyczne tych związków określone zostały z wykorzystaniem metod spektroskopowych XRD, IR, UV-Vis, XAS (X-ray Absorption Near Edge Spectroscopy), badań podatności magnetycznej i spektroskopii EPR. Badania struktury i składu otrzymanych związków zostały przeprowadzone na podstawie analizy elementarnej i rentgenostrukturalnych badań krystalograficznych (Single-crystal X-ray Diffraction) lub w przypadku polikrystalicznych proszków badań synchrotronowych.



Praca podkreśla znaczenie projektowania oraz badań spektroskopowych serii heterometalicznych związków koordynacyjnych, ze względu na ich interesujące właściwości magnetyczne, charakterystyczne dla magnesów molekularnych oraz polimerów koordynacyjnych. Opracowanie i badania tego typu materiałów molekularnych stanowią istotne wyzwanie w obszarze chemii materiałowej. Obecnie prowadzone są intensywne badania ukierunkowane na konstruowanie nowych materiałów o wysokich parametrach użytkowych, przeznaczonych do zastosowań m.in. w urządzeniach magnetycznych i optoelektronicznych, optyce nieliniowej, materiałach luminescencyjnych.

Aktywność zeolitów zawierających miedź w procesie selektywnej katalitycznej redukcji tlenków azotu

Magdalena Jabłońska

*Instytut Technologii Chemicznej, Uniwersytet w Lipsku, Linnéstraße 3, 04103 Lipsk, Niemcy;
 Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, ul. Tamka 12, 91-403
 Łódź;
 magdalena.jablonska@chemia.uni.lodz.pl*

Selektywna katalityczna redukcja tlenków azotu amoniakiem ($\text{NH}_3\text{-SCR-DeNO}_x$) jest jedną z najskuteczniejszych metod ograniczania emisji NO_x ze spalin silników wysokoprężnych, umożliwiającą osiągnięcie skuteczności usuwania tlenków azotu sięgającej do 95 %. Zeolity zawierające jony metali przejściowych należą do najczęściej stosowanych katalizatorów w procesie $\text{NH}_3\text{-SCR-DeNO}_x$ ze względu na ich wysoką aktywność i stabilność. Poznanie mechanizmu reakcji jest kluczowe dla racjonalnego projektowania i optymalizacji tych materiałów, prowadzących do zwiększenia stopnia konwersji NO_x oraz selektywności względem azotu.

Mechanizm reakcji $\text{NH}_3\text{-SCR-DeNO}_x$ na zeolitach zawierających miedź (ZSM-5, Y, ERI, SSZ-13 i SAPO-34) badano z wykorzystaniem technik *in situ* FT-IR, DR UV-Vis, EPR, spektroskopii impedancyjnej, metod temperaturowo-programowanych oraz analizy kinetycznej w stanie ustalonym z zastosowaniem izotopów (SSITKA). Wykazano, że reakcja przebiega poprzez dwa następujące po sobie etapy: pół-cykl redukcji ($\text{Cu}^{2+} \rightarrow \text{Cu}^+$) oraz pół-cykl utleniania ($\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Cu}^{2+}$). Badania *in situ* FT-IR wykazały, że etap redukcji zachodzi z udziałem kompleksów $[\text{Cu}^{\text{II}}(\text{OH})(\text{NH}_3)_{n-1}(\text{NO})]^+$, natomiast zwiększone tworzenie jonów NH_4^+ na zeolitach Cu-Y sprzyja wzrostowi aktywności procesu SCR w niskich temperaturach. W pół-cyklu utleniania, na podstawie badań *in situ* DR UV-Vis, zidentyfikowano kompleksy $\mu\text{-}\eta^2,\eta^2\text{-perokso-dimiedzi(II)}$. Wyniki badań temperaturowo-programowanych wykazały ponadto, że NO_x^- stanowią również kluczowe produkty pośrednie reakcji. Analiza SSITKA umożliwiła określenie czasu życia oraz stężenia powierzchniowych pośrednich związków azotowych, a także ocenę wpływu stosunku molowego $n(\text{Si})/n(\text{Al})$ na liczbę i reaktywność aktywnych centrów katalitycznych.

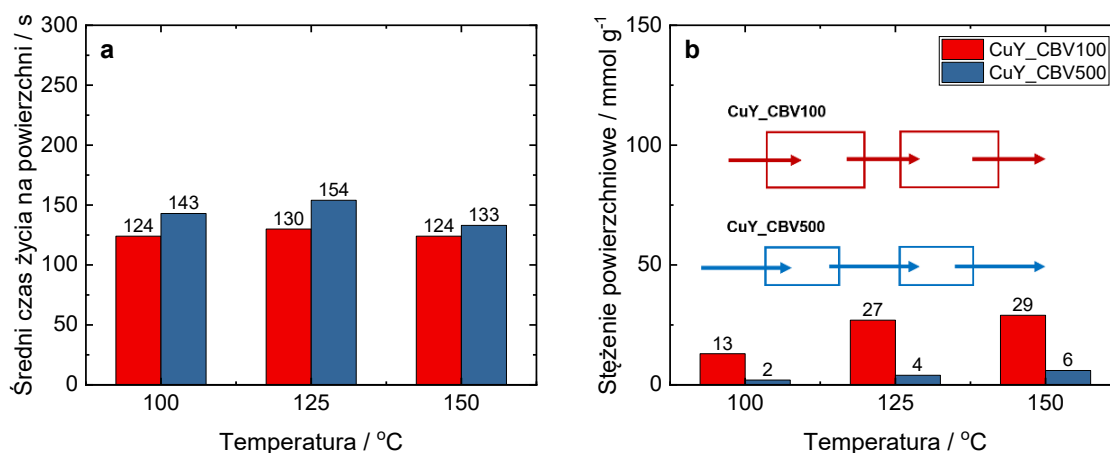


Fig. 1: a) Średni czas życia na powierzchni odwracalnie zaadsorbowanych cząsteczek azotu oraz b) stężenie powierzchniowe odwracalnie zaadsorbowanych cząsteczek azotu i produktów pośrednich prowadzących do powstawania azotu cząsteczkowego.



S02 WS08

Od ditlenku węgla do paliw alternatywnych

Bogdan Samojeden, Monika Motak

*AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, Wydział Energetyki i Paliw
Al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków;
e-mail motakm@agh.edu.pl*

Ograniczenie emisji ditlenku węgla stanowi jedno z kluczowych wyzwań naukowych i technologicznych. Od wielu lat rozwijane są metody CCS, polegające na wychwytywaniu i zatłaczaniu CO₂ do formacji geologicznych. Coraz większe znaczenie ma jednak również wykorzystanie CO₂ jako surowca w syntezach chemicznych, szczególnie w procesach prowadzących do otrzymywania paliw alternatywnych. Do najważniejszych kierunków należą uwodornienie CO₂ do metanu lub metanolu oraz produkcja gazu syntezowego w procesach reformingu.

Jedną z badanych przez nas metod chemicznego zagospodarowania CO₂ jest suchy reforming metanu (DRM). W procesie tym powstaje gaz syntezowy o stosunku molowym H₂:CO wynoszącym 1:1, odpowiedni między innymi do syntezy Fischera–Tropscha oraz produkcji paliw alternatywnych, takich jak eter dimetylowy. Proces może być prowadzony pod ciśnieniem atmosferycznym, jednak jego głównymi ograniczeniami są wysoka energochłonność i niedostateczna stabilność katalizatorów. Obecnie szczególną uwagę poświęca się katalizatorom niklowym. Ich zastosowanie ogranicza jednak powstawanie depozytu węglowego, prowadzącego do dezaktywacji katalizatora. Poszukiwanie trwałych i aktywnych układów katalitycznych pozostaje zatem ważnym wyzwaniem naukowym i przemysłowym.

Innym istotnym procesem jest uwodornienie ditlenku węgla do metanu, określane jako metanizacja. Reakcja ta wymaga pokonania wysokiej bariery energetycznej, dlatego konieczne jest zastosowanie odpowiedniego katalizatora zapewniającego wysoką szybkość i selektywność procesu. Klasycznym przykładem jest katalizator niklowy osadzony na tlenku glinu. Metanizacja może być wykorzystywana do otrzymywania syntetycznego gazu ziemnego SNG.

Gaz syntezowy może również stanowić źródło wodoru. Usuwanie CO z mieszaniny odbywa się w reakcji konwersji tlenku węgla z parą wodną, prowadzonej z zastosowaniem katalizatorów żelazowych lub miedziowych. Otrzymany wodór znajduje zastosowanie między innymi w produkcji amoniaku i zasilaniu ogniw paliwowych. Skuteczne usunięcie tlenków węgla jest szczególnie istotne, ponieważ mogą one dezaktywować stosowane katalizatory.

Obecnie jedynie niewielka część CO₂ jest wykorzystywana w przemyśle chemicznym, między innymi do produkcji mocznika, kwasu salicylowego i poliwęglanów. Wychwycony CO₂ może być również przekształcany w węglowodory i alkohole, w tym metanol. Wykorzystanie ditlenku węgla jako surowca stanowi więc perspektywiczny i coraz bardziej realny kierunek rozwoju nowoczesnych technologii chemicznych.



S02 WS09

Łamanie symetrii w materiałach molekularnych opartych na kompleksach metali – łączenie luminescencji, nieliniowej optyki i ferroelektryczności

Szymon Chorąży, Hubert Dziełak, Paweł J. Bonarek, Aleksander Hoffman, Mikołaj Żychowicz, Jan Rzepiela, Jakub J. Zakrzewski, Michał Liberka

Grupa Wielofunkcyjnych Materiałów Luminescencyjnych, Zakład Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński;
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, Polska;
simon.chorazy@uj.edu.pl

W ostatnich kilkunastu latach pokazano, że kompleksy metali przejściowych i lantanowców z ligandami organicznymi i nieorganicznymi, jak również ich kombinacje, są znakomitymi molekularnymi blokami budulcowymi do konstrukcji nowych generacji funkcjonalnych materiałów wykazujących ważne z punktu widzenia nowych technologii właściwości optyczne, magnetyczne, elektryczne i mechaniczne. W tym kontekście w naszych badaniach pokazaliśmy, że takie materiały oparte na kompleksach metali bloków d i f układu okresowego lub też ich połączeniu w heterometalicznych układach koordynacyjnych mogą być źródłem wielofunkcyjnych materiałów luminescencyjnych, które łączą zdolność do emisji światła z takimi efektami jak nanomagnetyzm molekularny,^[1] efekt fotomagnetyczny,^[2] przewodnictwo protonowe,^[3] wrażliwość na zmiany wilgotności,^[4] czy połączenie kilku różnych właściwości fizycznych.^[5] Nasze najnowsze wyniki, które będą przedmiotem tej prezentacji, pokazują, że poszerzona wielofunkcyjność staje się dostępna dzięki łamaniu symetrii krystalicznej danego materiału opartego na luminescencyjnych kompleksach metali. Przykładami takiej strategii są: (a) hybrydy molekularne oparte na kompleksach Mn(II) wykazujące odpowiedź fotoluminescencyjno-dielektryczno-magnetyczną na zmiany wilgotności,^[6] (b) hybrydy molekularne oparte na kompleksach Pt(II) wykazujące połączenie ferroelektryczności z termometrią optyczną,^[7] (c) heterometaliczne sieci koordynacyjne d-f wykazujące połączenie silnego efektu generacji drugiej harmonicznej (SHG) z nanomagnetyzmem molekularnym.^[8]

[1] J. Wang, J. J. Zakrzewski, M. Zychowicz, Y. Xin, H. Tokoro, S. Chorazy, S. Ohkoshi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2023**, 62, e202306372.

[2] J. J. Zakrzewski, R. Jankowski, M. Romanowska, J. Wang, D. Pinkowicz, B. Sieklucka, S. Ohkoshi, S. Chorazy, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64, e202424651.

[3] M. Niemiec, J. J. Zakrzewski, M. Reczyński, S. Chorazy, *Adv. Optical Mater.* **2025**, 13, 2404564.

[4] J. J. Zakrzewski, D. Jędrzejowski, J. Wang, H. Tokoro, S. Ohkoshi, D. Matoga, S. Chorazy, *Adv. Optical Mater.* **2025**, 13, 2403168.

[5] J. J. Zakrzewski, A. Hoffman, J. Wang, M. Pander, D. Matoga, H. Tokoro, S. Ohkoshi, S. Chorazy, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64, e202517109.

[6] A. Hoffman, M. Zychowicz, J. Wang, K. Matsuura, F. Kagawa, J. Rzepiela, M. Heczko, S. Baś, H. Tokoro, S. Ohkoshi, S. Chorazy, *Chem. Sci.* **2025**, 16, 8979.

[7] P. J. Bonarek, J. Rzepiela, M. Liberka, K. Wolski, J. Wang, H. Tokoro, S. Ohkoshi, F. Kagawa, J. J. Zakrzewski, S. Chorazy, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, 65, e9159585.

[8] H. Dziełak, P. J. Bonarek, J. J. Zakrzewski, S. Ohkoshi, S. Chorazy, *Chem. Commun.* **2026**, 62, 12421.



S02 WS10

Fotofizyka związków koordynacyjnych metali przejściowych z pochodnymi 2,6-bis(tiazolo-2-ylo)pirydyny

Anna Maria Maroń, Olga Drosik, Bartosz Zowiśłok, Katarzyna Choroba, Sławomir Kula, Anna Świtlicka, Barbara Machura

*Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach;
Szkolna 9, 40-006 Katowice;
anna.maron@us.edu.pl*

2,6-bis(tiazolo-2-ylo)pirydyny (dtpy) stanowią nową klasę pochodnych 2,2':6',2''-terpirydyn (terpy), które dotychczas nie były przedmiotem systematycznych badań jako ligandy koordynujące. Liczba opisanych w literaturze związków kompleksowych zawierających pochodne dtpy pozostaje nadal ograniczona w porównaniu z analogicznymi związkami kompleksowymi opartymi na pochodnych terpy. Wykorzystanie dtpy jako jednostki budulcowej związków kompleksowych metali przejściowych łączy wszystkie zalety 2,2':6',2''-terpirydyn, takie jak łatwa synteza metodą kondensacji Kröhnkego, sztywność rdzenia cząsteczki (ograniczająca bezpromieniste procesy dezaktywacji i zwiększająca efektywność procesów transferu energii), możliwość trójkleszczowej koordynacji do jonów metali przejściowych (eliminująca złożoność wynikającą z możliwości tworzenia stereoizomerów), łatwość modyfikacji właściwości optycznych poprzez odpowiednią substytucję. Jednocześnie zastąpienie peryferyjnych pierścieni pirydynowych pierścieniami tiazolowymi stanowi racjonalne podejście do dostrajania właściwości fotofizycznych. Właściwości fotofizyczne kompleksów zawierających pochodne terpy są w znacznym stopniu ograniczane przez termicznie aktywowane procesy dezaktywacji, prowadzące do bezpromienistego zaniku stanów wzbudzonych i niskiej intensywności emisji. Zwiększone właściwości π -akceptorowe pochodnych dtpy sprzyjają stabilizacji trypletowego stanu przeniesienia ładunku od metalu do liganda ($^3\text{MLCT}$), co może prowadzić do poprawy właściwości fotoluminescencyjnych związków kompleksowych metali zawierających te ligandy. W niniejszej prezentacji zostaną omówione właściwości fotofizyczne dla szeregu związków metali przejściowych z 4-podstawionymi pochodnymi 2,6-di-(tiazolo-2-ylo)pirydyny (4-R-dtpy), jako analogów dla związków opartych o 4'-podstawione pochodne 2,2':6',2''-terpirydyn (4'-R-dtpy).

Podziękowanie: Badania finansowane przez Narodowe Centrum Nauki, SONATA 2020/39/D/ST4/00286 oraz Priorytetowe Obszary Badawcze Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach (POB-2).



S02 WS11

Związki koordynacyjne rutenu(II) – między strukturą fotofizyką a aktywnością przeciwnowotworową

Anna Świtlicka, Anna Maroń^a, Bartosz Zowiśłok^a, Dagmara Wójkowska^b, Bogusława Luzak^b

^a Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach, anna.switlicka@us.edu.pl

^b Zakład Zaburzeń Krzepnięcia Krwi, Katedra Nauk Biomedycznych, Uniwersytet Medyczny w Łodzi,

Związki koordynacyjne rutenu(II) stanowią interesującą grupę układów molekularnych, łączących różnorodność strukturalną z unikalnymi właściwościami spektroskopowymi i fotofizycznymi oraz potencjałem zastosowań w chemii biologicznej. Ruten jest szczególnie interesującym centrum metalicznym w projektowaniu potencjalnych związków przeciwnowotworowych ze względu na możliwość występowania w różnych stanach utlenienia, zróżnicowaną kinetykę wymiany ligandów oraz możliwość precyzyjnego kształtowania właściwości kompleksów poprzez modyfikację ich sfery koordynacyjnej. Istotna jest również ich zdolność do oddziaływania z biomolekułami, w tym DNA i białkami, oraz możliwość wykorzystania procesów redoks i specyficznych warunków środowiska komórkowego do modulowania aktywności biologicznej. W wystąpieniu przedstawione zostaną wybrane wyniki badań nad kompleksami rutenu(II) z N-donorowymi ligandami tridentnymi, ze szczególnym uwzględnieniem zależności pomiędzy strukturą kompleksów a ich właściwościami elektrodynamicznymi, spektroskopowymi i optycznymi. Omówione zostaną strategie modyfikacji sfery koordynacyjnej rutenu oraz wpływ budowy ligandów na właściwości kompleksów, w tym ich absorpcję, emisję i procesy fotofizyczne. W dalszej części przedstawione zostaną omówione dotychczasowe próby zastosowania omawianych układów jako potencjalnych związków o aktywności przeciwnowotworowej.



S02 WS12

Wpływ pH na tworzenie i trwałość kompleksów galu(III) z ligandami barbiturowymi, tiobarbiturowymi i tiouracylowymi

Monika Skrobańska, Michał Zabiszak, Małgorzata T. Kaczmarek, Renata Jastrząb

Zakład Chemii Koordynacyjnej, Wydział Chemii UAM;

ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;

monika.skrobanska@amu.edu.pl

Poszukiwanie nowych środków terapeutycznych pozostaje jednym z kluczowych celów współczesnej medycyny, szczególnie w kontekście zwiększania skuteczności leczenia przy jednoczesnym ograniczaniu działań niepożądanych. Chociaż barbiturany są powszechnie znane ze swoich właściwości uspokajających, przeciwdrgawkowych i anestetycznych, ich długotrwałe stosowanie może prowadzić do poważnych skutków ubocznych o charakterze neurologicznym oraz do kumulacji w organizmie. Kwas barbiturowy i jego pochodne, budzą zainteresowanie ze względu na zdolność do tworzenia kompleksów z jonami metali oraz związaną z tym aktywność biologiczną. Obecność atomów donorowych, takich jak azot i tlen, umożliwia tworzenie wiązań koordynacyjnych z jonami metali. W roztworze barbiturany ulegają deprotonacji i koordynują głównie poprzez atomy azotu, chociaż w zależności od rodzaju jonu metalu możliwe są również alternatywne sposoby koordynacji z udziałem atomów tlenu.

Jony metali odgrywają istotną rolę w regulacji procesów biochemicznych i prawidłowym funkcjonowaniu organizmów żywych, dlatego badania nad ich oddziaływaniami z biologicznie aktywnymi ligandami stanowią ważny kierunek rozwoju chemii medycznej i koordynacyjnej. Szczególne zainteresowanie wzbudzają układy zawierające siarkę, jednak ograniczona liczba doniesień dotyczących kompleksowania jonów galu z ligandami siarkowymi skłania do dalszych badań w tym obszarze. Obiecującą grupę związków stanowią pochodne uracylu, zwłaszcza jego tioanalogi, które ze względu na szerokie spektrum aktywności biologicznej są uznawane za uprzywilejowane struktury w projektowaniu nowych leków. Ich potencjał wynika z możliwości modulowania właściwości fizykochemicznych i biologicznych poprzez tworzenie kompleksów z jonami metali z udziałem centrów donorowych zawierających atomy azotu, tlenu i siarki. Związki te znajdują zastosowanie m.in. w terapii nowotworowej, leczeniu cukrzycy oraz AIDS, co czyni je obiecującymi obiektami dalszych badań nad nowymi układami koordynacyjnymi o potencjalnym znaczeniu terapeutycznym.



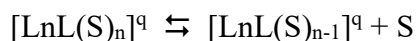
S02 WS13

Równowagi hydratacyjne w roztworach związków Ln(III) i ich konsekwencje strukturalne, spektroskopowe oraz termodynamiczne

Rafał Janicki

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii;
ul. F. Joliot Curie 14, 50-383;
rafal.janicki@uwr.edu.pl

Cechą charakterystyczną jonów pierwiastków f-elektronowych jest ich zdolność do tworzenia związków o różnych, najczęściej wysokich liczbach koordynacyjnych (8-10), co więcej związki takie mogą współistnieć w roztworach. Najczęściej, choć nie zawsze, zmiany liczby koordynacyjnej jonu Ln(III), są następstwem usunięcia lub wiązania z jonem centralnym cząsteczki rozpuszczalnika w myśl reakcji:



Jednym z głównych powodów, dla których podejmuje się badania tego typu reakcji jest fakt, iż związki Gd(III) z ligandami poliaminopolikarboksylowymi i ich pochodnymi wykorzystywane są jako czynniki kontrastujące w MRI, zaś istnienie równowag hydratacyjnych w roztworach tych związków znacząco poprawia ich właściwości kontrastujące.

Wykład będzie stanowił próbę odpowiedzi na następujące pytania:

- 1) Jak zmiana liczby koordynacyjnej jonu Ln(III) wpływa na strukturę przestrzenną związków i ich symetrię?
- 2) Jakie są konsekwencje spektroskopowe spowodowane zmianą liczby koordynacyjnej?
- 3) Jakie są wartości funkcji termodynamicznych (ΔG , ΔH i ΔS) reakcji dehydratacji?
- 4) Czy natura oddziaływania Gd(III)-OH₂ ma charakter czysto jonowy?



S02 WS14

Nowoczesne techniki membranowe w usuwaniu zanieczyszczeń ze środowiska wodnego - od jonów metali do farmaceutyków

Anna Nowik-Zajac

*Uniwersytet Jana Długosza w Częstochowie, Wydział Nauk Ścisłych, Przyrodniczych i Technicznych;
al. Armii Krajowej 13/15 42-200 Częstochowa;
a.zajac@ujd.edu.pl*

Dynamiczny rozwój technologii membranowych otwiera nowe możliwości w zakresie selektywnej separacji jonów metali oraz usuwania zanieczyszczeń organicznych i nieorganicznych ze środowiska wodnego. Szczególną rolę odgrywają nowoczesne materiały membranowe oparte na związkach makrocyklicznych, nanomateriałach oraz materiałach hybrydowych, które dzięki wysokiej selektywności i stabilności znajdują zastosowanie w procesach oczyszczania wód i odzysku cennych składników z roztworów wieloskładnikowych.

Dotychczasowe badania potwierdziły wysoką skuteczność membran zawierających m.in. kaliks[4]pirole, kaliksareny oraz pochodne cyklodekstryn w selektywnym usuwaniu jonów srebra(I), ołowiu(II), rtęci(II), chromu(VI) i arsenu(V) z roztworów wodnych, a także w eliminacji barwników organicznych. Właściwości transportowe membran zależą od budowy chemicznej przenośnika, rodzaju matrycy polimerowej, zastosowanego plastyfikatora oraz warunków prowadzenia procesu separacji.

W ostatnich latach obserwuje się intensywny rozwój nowych materiałów membranowych opartych na nanomateriałach, membranach hybrydowych oraz biopolimerach, które znajdują zastosowanie w usuwaniu zanieczyszczeń nowej generacji, w tym farmaceutyków, pestycydów i substancji powierzchniowo czynnych. Coraz większe znaczenie mają również procesy zintegrowane, łączące techniki membranowe z adsorpcją, elektrodializą oraz modelowaniem matematycznym procesów separacyjnych.

Rozwój nowoczesnych technik membranowych umożliwia projektowanie wydajnych i selektywnych procesów oczyszczania wód, odpowiadających na współczesne wyzwania związane z obecnością zanieczyszczeń nieorganicznych i organicznych w środowisku.



S02 WS15

Spektroskopia NMR ciała stałego trudnych jąder: od chemii metaloorganicznej i koordynacyjnej do perowskitów

Piotr Paluch, Ewelina Kuc

*Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk;
ul. Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź;
e-mail: ppaluch@cbmm.lodz.pl*

Spektroskopia NMR w ciele stałym pozwala bezpośrednio badać lokalną strukturę i otoczenie elektronowe centrów metalicznych, jednak pomiary wielu jąder metali przejściowych i ciężkich pierwiastków pozostają dużym wyzwaniem. W przypadku ^{195}Pt i ^{207}Pb głównym ograniczeniem jest bardzo duża anizotropia przesunięcia chemicznego (CSA), natomiast w przypadku ^{103}Rh , ^{187}Os i ^{57}Fe dodatkowymi ograniczeniami są niski współczynnik żyromagnetyczny, mała zawartość naturalna niektórych izotopów oraz długie czasy relaksacji. W referacie zostaną przedstawione strategie pośredniej detekcji tych jąder, wykorzystujące szybkie wirowanie pod kątem magicznym, eksperymenty HMQC oraz selektywne wzbudzanie satelit rotacyjnych. Na przykładzie ^{195}Pt omówione zostanie zastosowanie detekcji ^1H w eksperymentach D-HMQC oraz porównanie różnych schematów wzbudzenia, umożliwiających pomiary przy bardzo dużych wartościach CSA. Szczególna uwaga zostanie poświęcona perowskitom halogenkowym ołowiu. Korelacje ^1H – ^{207}Pb , uzupełnione widmami ^1H i ^{13}C , umożliwiają badanie oddziaływań na granicy części organicznej i nieorganicznej oraz porównanie lokalnego uporządkowania w stanach krystalicznym, szklistym i stopionym. Pozwala to śledzić zachowanie oktaedrów PbX_6 i określać, które elementy warstwowej struktury są zachowane po utracie uporządkowania dalekiego zasięgu. Dla ^{103}Rh wykorzystanie dużych sprzężeń skalarnych ^{31}P – ^{103}Rh w eksperymentach J-HMQC, w połączeniu z selektywnym wzbudzaniem satelit rotacyjnych, umożliwia rejestrację widm ^{103}Rh z kilku miligramów próbki w czasie od kilkudziesięciu minut do kilku godzin oraz wyznaczanie tensorów przesunięcia chemicznego. Rozwinięciem tej koncepcji są sekwencje $^1\text{H} \rightarrow ^{31}\text{P} \rightarrow \text{X} \rightarrow ^{31}\text{P} \rightarrow ^1\text{H}$, które otwierają drogę do czułej detekcji ^{187}Os i ^{57}Fe w kompleksach fosfinowych. Przedstawione podejścia tworzą wspólną platformę metodologiczną dla badań struktury związków metaloorganicznych, kompleksów koordynacyjnych, katalizatorów i materiałów funkcjonalnych.

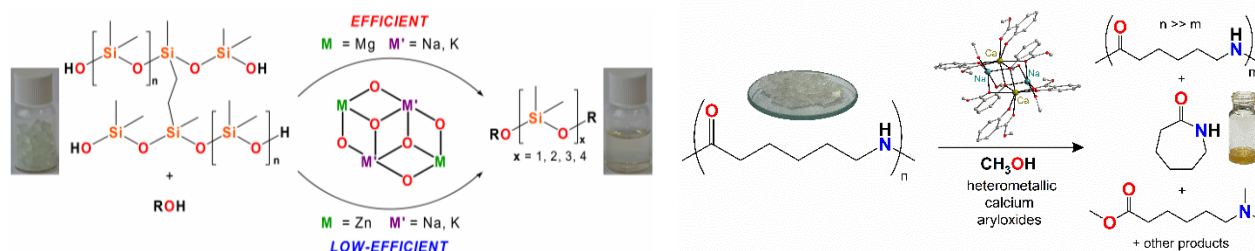
Homometaliczne i heterometaliczne aryloksany jako prekursory układów katalitycznych w recyklingu materiałów polimerowych

Rafał Petrus

Wydział Chemiczny Politechniki Wrocławskiej, Smoluchowskiego 23, 50-370 Wrocław
 rafal.petrus@pwr.edu.pl

W obecnej chwili świat zmagą się z narastającym problemem odpadów polimerowych. Szacuje się, że do dnia dzisiejszego wyprodukowano około 8 miliardów ton metrycznych plastiku, z czego blisko 4,9 miliarda ton zostało przekazanych do składowania na wysypiskach śmieci lub trafiło do środowiska. Wszystkie te odpady powinny zostać poddane recyklingowi w celu odzysku i ponownego wykorzystania zawartych w nich surowców. Obecnie do przetwarzania materiałów polimerowych wykorzystuje się recykling mechaniczny lub chemiczny. Recykling chemiczny stosuje się w przypadku tworzyw, które nie nadają się do recyklingu mechanicznego, a więc przede wszystkim odpadów mocno zanieczyszczonych, trudnych w segregacji, a także wymagających zastosowania zbyt kosztownych rozwiązań technologicznych. Metoda ta polega na rozkładzie polimerów w następstwie reakcji chemicznych do wyjściowych monomerów lub ich pochodnych.

Głównym celem prezentowanych badań jest opracowanie wysoce wydajnych metod chemicznego recyklingu polimerów do niskocząsteczkowych związków organicznych. Heterometaliczne kompleksy jonów metali grupy 1 oraz Mg^{2+} , Ca^{2+} lub Zn^{2+} wykorzystano jako efektywne katalizatory w reakcjach alkoholizy poliestrów, poliamidów lub gumy silikonowej, które przeprowadzano w warunkach solwotermalnych z wykorzystaniem reaktorów wysokociśnieniowych (Rysunek 1).¹⁻⁴ Wyniki tych badań umożliwiły znalezienie korelacji pomiędzy strukturą zastosowanych katalizatorów a ich aktywnością katalityczną w reakcjach degradacji polimerów. Udowodniono, że obecność dwóch różnych jonów metali w strukturze kompleksu prowadzi do występowania oddziaływań synergicznych, które umożliwiają osiągnięcie większej wydajności i selektywności badanych reakcji, przy jednoczesnym skróceniu czasu ich trwania oraz ograniczeniu udziału reakcji ubocznych w odniesieniu do ich homometalicznych odpowiedników lub prostych katalizatorów kwasowych i zasadowych.³⁻⁴



Rys. 1. Wybrane aplikacje katalityczne heterometalicznych kompleksów w reakcjach alkoholizy odpadów polimerowych.

Podziękowania: Udział w konferencji sfinansowano ze środków NCN w ramach projektu o nr 2023/49/B/ST4/04068

1. R. Petrus, D. Bykowski, P. Sobota, ACS Catalysis 2016, 6, 5222.
2. R. Petrus, T. Lis, A. Kowaliński, Dalton Trans. 2022, 51, 9144.
3. R. Petrus, J. Utko, R. Gniłka, M. Fleszar, T. Lis, P. Sobota, Macromolecules 2021, 54, 2449.
4. R. Petrus, K. Matuszak, A. Kowaliński, T. Lis, Inorg. Chem. Front., 2025, 12, 7083.

Zrównoważona katalityczna konwersja CO₂ do cyklicznych organicznych węglanów z użyciem nanomateriałów hybrydowych

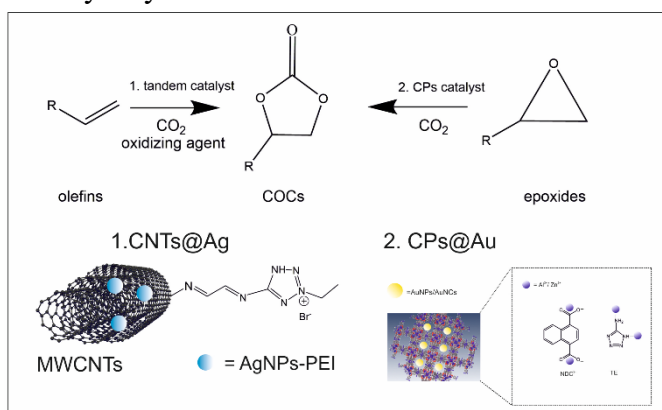
Elżbieta Megiel, Kinga Wasiluk, Gabriela Kopacka, Huong Truc Pham, Serra Güngör

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Pasteura 1, 02-093 Warszawa;

e.megiel2@uw.edu.pl;

emegiel@chem.uw.edu.pl

Katalityczna konwersja CO₂ do cyklicznych organicznych węglanów COCs (ang. *Cyclic Organic Carbonates*) z użyciem epoksydów jest procesem opartym na zasadach zrównoważonego rozwoju stanowiącym atrakcyjne rozwiązanie dla nowych technologii *Carbon Capture and Utilization* (CCU). Proces przebiega ze 100 % wydajnością atomową, może być prowadzony bez użycia rozpuszczalników, a otrzymywane produkty znajdują szereg przemysłowych zastosowań. Stosowane są między innymi jako elektrolity w bateriach litowo-jonowych, wysokowrzące rozpuszczalniki polarne w przemyśle kosmetycznym i farmaceutycznym i monomery do otrzymywania polimerów biodegradowalnych.[1-3] Jednak uzyskanie zadowalających wydajności dla reakcji cykloaddycji CO₂ do epoksydów wymaga stosowania efektywnych układów katalitycznych.



Opracowywane w naszym zespole układy katalityczne, na bazie polimerowych nanomateriałów hybrydowych, umożliwiają uzyskanie wysokich stopni konwersji epoksydów i wysokich wydajności otrzymywania COCs w łagodnych warunkach prowadzenia reakcji (80 °C; 1.5 MPa CO₂) bez użycia rozpuszczalników.[4, 5]

W syntezie wysokoporowatych polimerów koordynacyjnych typu MOF (CPs) stosujemy ligandy dikarboksylowe z ugrupowaniami

naftalenowymi, triazolowymi oraz porfirynowymi, a centrami koordynacji są klastry jonów metali o silnych właściwościach kwasowych, które są jednocześnie bezpieczne dla środowiska (Al³⁺, Zn²⁺). Zaprojektowane w naszej grupie katalizatory tandemowe, skonstruowane na bazie funkcjonalizowanych nanorurek węgla (CNTs@Ag), umożliwiają efektywne prowadzenie procesu oksydacyjnej karboksylacji, czyli otrzymywania COCs bezpośrednio z olefin bez wydzielania epoksydów (*one-pot synthesis*).[6] Ze względu na toksyczne właściwości niektórych epoksydów jest to rozwiązanie znacznie bardziej ekologiczne. Układy hybrydowe z nanocząstkami i nanoklastrami metali stanowią tandemowe katalizatory dla reakcji epoksydacji olefin oraz cykloaddycji CO₂ do tworzonych *in situ* epoksydów.

Opracowane układy katalityczne mogą być zastosowane w projektowaniu nowych technologii CCU.

References

1. Yan, T., et al., Journal of CO₂ Utilization, 2023. **68**: p. 102355.
2. Kamphuis, A.J. et al., Green Chemistry, 2019. **21**(3): p. 406-448.
3. Pescarmona, P.P. et al., Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry, 2021. **29**: p. 100457.
4. Kopacka, G. et al., International Journal of Molecular Sciences, 2024. **25**(2): p. 1020.
5. Wasiluk, K. et al., Molecules, 2025. **30**(24): p. 4777.
6. Wang, H. et al., Molecular Catalysis, 2024. **565**: p. 114417.

Związki inkluzyjne i interkalacyjne tlenku arsenu(III)

Piotr A. Guńka

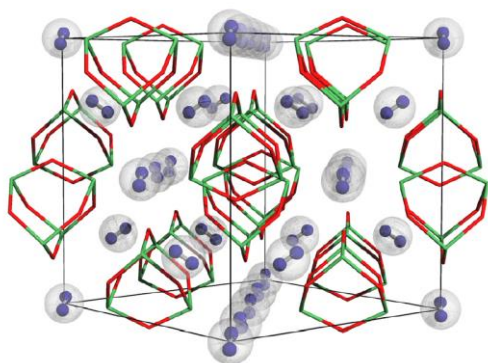
Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej;
 ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa;
 piotr.gunka@pw.edu.pl

Tlenek arsenu(III) należy do grupy związków nieorganicznych o wyjątkowo bogatej chemii strukturalnej wynikającej z obecności stereochemicznie aktywnych wolnych par elektronowych na atomach arsenu oraz wtórnych oddziaływań typu $\text{As}\cdots\text{O}$. Cechy te prowadzą do powstawania różnorodnych motywów strukturalnych, a także umożliwiają tworzenie związków inkluzyjnych i interkalacyjnych. W ostatnich latach wykazano zdolność tlenku arsenu(III) do tworzenia związków inkluzyjnych z lekkimi cząsteczkami i atomami, takimi jak wodór i hel (Rysunek 1a), co poszerzyło wiedzę na temat oddziaływań gospodarza z gościem w układach nieorganicznych.[1]

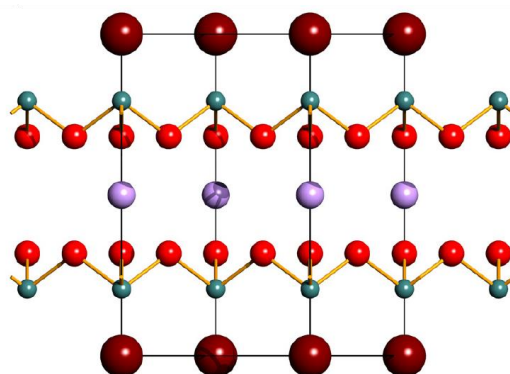
W prezentacji omówione zostaną wyniki badań strukturalnych poświęconych związkom inkluzyjnym oraz interkalatom tlenku arsenu(III) z halogenkami i pseudohalogenkami metali alkalicznych (Rysunek 1b). Szczególna uwaga zostanie poświęcona wpływowi oddziaływań wtórnych $\text{As}\cdots\text{O}$ i $\text{As}\cdots\text{halogen}$ na stabilizację struktur oraz mechanizmom wbudowywania obcych składników do sieci krystalicznej As_2O_3 . [1] Przedstawione zostaną również zależności pomiędzy budową krystaliczną a właściwościami fizycznymi otrzymanych materiałów.

W świetle najnowszych doniesień o niezwykłych właściwościach optycznych interkalatów tlenku arsenu(III), związki te jawią się jako obiecująca grupa materiałów funkcjonalnych.[2] Omówione zostaną perspektywy dalszych badań obejmujące projektowanie nowych układów inkluzyjnych i interkalacyjnych oraz poszukiwanie zależności struktura–właściwości istotnych dla rozwoju współczesnej chemii nieorganicznej i materiałowej.

(a)



(b)



Rysunek 1. Struktura krystaliczna związków inkluzyjnych tlenku arsenu(III) z wodorem i helem (a) oraz związku interkalacyjnego tlenku arsenu(III) z bromkiem potasu. Atomy As, O, H, He, K i Br zaznaczona są odpowiednio kolorami zielonym, czerwonym, granatowym, jasnoszarym, fioletowym i brązowym.

[1] Guńka, P. A. Inclusion and Intercalation Compounds of Arsenic(III) Oxide Polymorphs. *CrystEngComm* **2025**, 27 (13), 1862–1872. <https://doi.org/10.1039/d5ce00135h>.

[2] Zeng, W.; Tian, Y.; Zeng, H.; Lin, Z.; Zou, G. Breaking Performance Barriers in $\text{KBe}_2\text{BO}_3\text{F}_2$ (KBBF) Analogs by Functional Group Self-Polymerization. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64 (12), e202422818. <https://doi.org/10.1002/anie.202422818>.



Komunikaty sekcyjne



S02 KS01

Novel Readily Available Lanthanide-Halide Complexes as Potential Precursors to Single-Molecule Magnets

Magdalena Abramowicz, Przemysław J. Malinowski

*Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego;
ul. Stefana Banacha 2C, 02-097 Warszawa;
m.abramowicz@cent.uw.edu.pl*

Single-Molecule Magnets (SMMs) are individual molecules that can act as nanoscale magnetic particles. These molecular magnets exhibit strong magnetic anisotropy and can retain their magnetization for a long time without an external magnetic field.[1] Because this phenomenon is molecular, it is fundamentally different from traditional bulk magnets like AlNiCo or SmCo. SMMs have attracted great interest due to potential applications in data storage, molecular electronics, and quantum computing. However, their practical use is limited because they usually work only at very low temperatures. Currently, lanthanide-based compounds form the best SMMs.[2]

The performance of lanthanide SMMs strongly depends on the geometry around the metal center, where axial symmetry is most favorable. Even small distortions from linearity increase magnetic relaxation. To control this geometry, Weakly Coordinating Anions (WCAs) can be used, as they interact weakly and do not distort the cation.[3]

In this work, we present a straightforward synthesis of new lanthanide-halide complexes of the types $[\text{LnX}_2]^+$ and $[\text{LnX}]^{2+}$ ($\text{Ln} = \text{Dy}, \text{Y}, \text{Er}$; $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) using the readily available WCA $[\text{Al}(\text{OC}(\text{CF}_3)_3)_4]^-$. Single-crystal X-ray diffraction shows a linear $\text{X}-\text{Ln}-\text{X}$ arrangement and demonstrates how the coordination sphere changes with different halides (Cl^- , Br^- , I^-) and coordinating solvents. Importantly, the choice of halide directly affects physical properties, such as thermal stability (TGA/DSC), as well as the chemical reactivity of these complexes. These findings provide useful guidelines for using these halide salts as promising precursors for advanced SMMs.

References

- [1] Christou, G.; Gatteschi, D.; Hendrickson, D.N.; Sessoli, R. *MRS Bull*, 2000, 25(11), 66–71.
- [2] Guo, F.S.; Day, B. M.; Chen, Y.C.; Tong, M. L.; Mansikkamäki, A.; Layfield, R.A. *Science*, 2018, 362, 1400–1403.
- [3] Riddlestone I. M.; Kraft A.; Schaefer J.; Krossing I. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2018, 57, 13982–14024.

Synteza i reaktywność *N*-heterocyklicznych karbenowych kompleksów miedzi z ligandami fluoroalkoksyłowymi

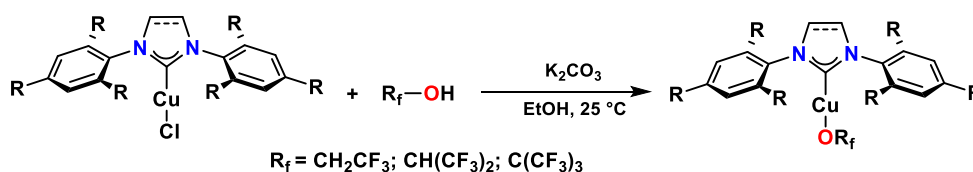
Sylwia Ostrowska

Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614
Poznań, Polska
sylost@amu.edu.pl

Fluorowane alkohole takie jak heksafluoroizopropanol (HFIP) czy trifluoroetanol (TFE) stanowią niezwykle wszechstronne narzędzia w chemii organicznej, łącząc wysoką polarność, niską nukleofilowość oraz silne właściwości donorów wiązań wodorowych.¹ Obecność elektronoakceptorowych grup fluoroalkilowych nadaje tym alkoholom unikalne właściwości solwatujące, wynikające z tworzenia rozbudowanych sieci wiązań wodorowych.^{1,2} Fluorowane alkohole są doskonałymi rozpuszczalnikami wykorzystywanymi w syntezie heterocykli, reakcjach funkcjonalizacji wiązań C–H, reakcjach sprzęgania krzyżowego oraz w kontrolowanej deprotekcji grup funkcyjnych w obecności innych, mniej stabilnych grup ochronnych.²

W ciągu ostatniej dekady społeczność chemików syntetyków koncentrowała się na opracowywaniu bardziej ekologicznych metod syntezy, przy czym znaczna część badań została ukierunkowana na rozwój układów katalitycznych opartych na tanich i powszechnie dostępnych metalach.³ Aby sprostać temu wyzwaniu, podjęto liczne próby opracowania kompleksów miedzi z ligandami organicznymi, w szczególności *N*-heterocyklicznych karbenowych (NHC) kompleksów miedzi zawierających ligand alkoksyłowy.⁴

W niniejszej pracy przedstawiam syntezę nowej serii kompleksów miedzi z *N*-heterocyklicznymi karbenowymi ligandami o zróżnicowanych właściwościach sterycznych i elektronowych, zawierających ponadto ligandy fluoroalkoksyłowe (OR_f) (Rysunek 1). Wstępne badania reaktywności tych związków doprowadziły do otrzymania szeregu nowych kompleksów istotnych z punktu widzenia chemii i katalizy związków miedzi.⁵



Rysunek 1. Schemat syntezy kompleksów typu Cu(NHC)(OR_f).

Literatura:

1. An X.; Xiao J. *Chem. Rec.* **2020**, *20*, 142.
2. Motiwala H. F.; Armaly A. M.; Cacioppo J. G.; Coombs T. C.; Koehn K. R. K.; Norwood IV V. M.; Aubé J. *Chem. Rev.* **2022**, *122*, 12544.
3. Chirik P.; Morris R. *Acc. Chem. Res.* **2015**, *48*, 2495.
4. Danopoulos A. A.; Simler T.; Braunstein P. *Chem. Rev.* **2019**, *119*, 3730.
5. a) Ostrowska S.; Arnaut P.; Liptrot D. J.; Cazin C. S. J.; Nolan S. P. *Chem. Commun.* **2023**, *59*, 9126. b) Ostrowska S.; Cari G.; Czapik A.; Kwit M.; Cazin C. S. J.; Nolan S. P. *Eur. J. Inorg. Chem.* **2025**, *28*, e202400740.



S02 KS03

Od elektrochemicznej depolimeryzacji ligniny do funkcjonalnych materiałów węglowych dla zastosowań adsorpcyjnych i katalitycznych

Piotr Łątka^a, Katarzyna Barańska^{a,b}, Anna Rokicińska^a, Bartosz Mozgawa^a, Marek Dębosz^a, Aleksandra Weselucha-Birczyńska^a, Adam Slabon^c, Piotr Kuśtrowski^a

^aWydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

^bSzkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Uniwersytet Jagielloński, ul. Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków

^cKatedra Chemii Nieorganicznej, Uniwersytet Wuppertal, Gaußstraße 20, 42119 Wuppertal, Niemcy
e-mail: piotr.kustrowski@uj.edu.pl

Lignina, jako główny składnik biomasy lignocelulozowej, stanowi obiecujący surowiec odnawialny do otrzymywania wartościowych produktów chemicznych oraz materiałów funkcjonalnych. Pomimo jej powszechnej dostępności, ze względu na stabilność chemiczną kształtowaną charakterem aromatycznym, większość ligniny nadal pozostaje wykorzystywana głównie do celów energetycznych. Jedynie niewielka jej część znajduje zastosowanie w bardziej zaawansowanych technologicznie aplikacjach. Opracowanie efektywnych metod zagospodarowania ligniny wydaje się zatem istotnym kierunkiem działań prowadzących do zastąpienia części surowców petrochemicznych oraz bardziej kompleksowego wykorzystania biomasy. Wśród różnych strategii transformacji ligniny szczególne zainteresowanie wzbudzają procesy elektrochemiczne, umożliwiające prowadzenie jej depolimeryzacji w łagodnych warunkach, w środowisku wodnym oraz bez konieczności stosowania znacznych ilości dodatkowych reagentów. Istotnym ograniczeniem tego podejścia jest jednak niecałkowita konwersja substratu, skutkująca powstawaniem znacznych ilości częściowo przekształconej frakcji ligninowej. Jej dalsze zagospodarowanie poprzez wykorzystanie jako prekursora funkcjonalnych materiałów węglowych może stanowić atrakcyjną strategię zwiększającą efektywność całego procesu oraz ograniczającą ilość formowanych odpadów.

W prezentowanej pracy przeanalizowano możliwość przekształcenia pozostałości uzyskiwanych w wyniku częściowej elektrochemicznej depolimeryzacji ligniny Kraft w funkcjonalne materiały węglowe o właściwościach adsorpcyjnych i katalitycznych. Proces rozkładu elektrochemicznego prowadzono przez maksymalnie 6 godzin przy potencjale $-1,5$ V względem Ag/AgCl, stosując elektrody Cu, Ag, Al lub Ni w obecności K_2CO_3 . Analiza właściwości otrzymanych pozostałości ligninowych wykazała, że wydłużenie czasu obróbki elektrochemicznej prowadzi do stopniowych zmian w strukturze polimeru, obejmujących m. in. powstawanie grup karbonylowych oraz modyfikację podstawienia pierścieni aromatycznych. Jednocześnie zachowanie zasadniczego szkieletu aromatycznego umożliwiło dalsze wykorzystanie tych frakcji jako prekursorów w procesie karbonizacji prowadzonej w temperaturze 850 °C przez 4 h. Obecny w materiale węglan potasu pełnił podczas tego etapu funkcję aktywatora chemicznego. Wytworzone materiały węglowe charakteryzowały się wysoko rozwiniętą powierzchnią właściwą oraz obecnością struktury mikro- i mezoporowatej. Stwierdzono, iż wydłużenie czasu obróbki elektrochemicznej sprzyja rozwojowi mezoporowatości, zwiększeniu uporządkowania struktur warstwowych węgla oraz zmniejszeniu zawartości powierzchniowych grup tlenowych. Pomimo niskiego stopnia uporządkowania grafitycznego i w znacznym stopniu amorficznego charakteru, otrzymane materiały wykazywały wysoką skuteczność w adsorpcji fenolu z roztworów wodnych. Jednocześnie cechowały się bardzo dobrą aktywnością katalityczną w reakcji utleniania SO_2 do SO_3 , która mogła zostać dodatkowo zwiększona poprzez wprowadzenie ugrupowań azotowych na drodze obróbki gazowym NH_3 .

Rola architektury mezoporowatego nośnika krzemionkowego w kształtowaniu aktywności katalitycznej spinelu Co_3O_4 w procesie dopalania toluenu

Anna Rokicińska, Bartosz Mozgawa, Sofiia Putko, Marek Drozdek, Piotr Kuśtrowski

Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
e-mail: anna.rokicinska@uj.edu.pl

Mezoporowate materiały krzemionkowe są szeroko stosowane jako nośniki faz aktywnych katalitycznie ze względu na rozwiniętą strukturę porowatą, stabilność termiczną oraz możliwość stabilizacji wysoko zdyspergowanych centrów aktywnych. Parametry takie jak architektura i rozmiar porów, jak również morfologia cząstek nośnika, mogą istotnie wpływać na dyspersję fazy aktywnej, jej stabilność oraz dostępność centrów katalitycznych dla reagentów. Szczególnie interesujące są układy umożliwiające precyzyjną kontrolę budowy przestrzennej nośnika, obejmujące zarówno uporządkowane struktury mezoporowate, jak i materiały o bardziej złożonej budowie, np. puste sfery mezoporowate. Odpowiedni dobór właściwości teksturalnych i morfologicznych nośnika SiO_2 ma istotne znaczenie w reakcjach utleniania lotnych związków organicznych, w których efektywny transport masy oraz stabilizacja centrów redoksowych odgrywają kluczową rolę w kształtowaniu aktywności katalizatora. W przedstawionej pracy przeprowadzono kompleksowe porównanie układów zawierających fazę spinelową Co_3O_4 osadzoną na nośnikach krzemionkowych o zróżnicowanej strukturze porowatej, obejmujących żel krzemionkowy, uporządkowane sita mezoporowate (MCM-41, MCM-48 i SBA-15) oraz puste mezoporowate sfery ($@\text{mSiO}_2$). Materiały testowano w procesie całkowitego utleniania toluenu, analizując wpływ struktury nośnika na właściwości fazy Co_3O_4 , aktywność katalityczną oraz mechanizm zachodzącej reakcji.

Analiza niskokątowego XRD potwierdziła obecność uporządkowanych struktur mezoporowatych w materiałach MCM-41, MCM-48 oraz SBA-15, podczas gdy żel krzemionkowy oraz $@\text{mSiO}_2$ wykazywały charakter amorficzny. Badania teksturalne wykazały, że uporządkowane mezoporowate krzemionki oraz $@\text{mSiO}_2$ charakteryzują się wysoko rozwiniętą powierzchnią właściwą (1000-1330 m^2/g) oraz znaczną objętością porów. Materiał $@\text{mSiO}_2$, pomimo mniejszej objętości mezoporów, wyróżniał się unikalną architekturą pustych sfer, umożliwiającą lokalizację fazy aktywnej w obrębie mezoporowatej powłoki. Depozycja Co_3O_4 prowadziła do częściowego zmniejszenia powierzchni właściwej i objętości porów, co wskazuje na zajmowanie mezokanałów przez cząstki fazy aktywnej, przy zachowaniu zasadniczej struktury porowatej nośników. Analizy XRD, UV-Vis-DR, XAS oraz XPS potwierdziły obecność fazy spinelowej Co_3O_4 we wszystkich zsyntezowanych materiałach. Odnotowano jednak wpływ rozmiarów porów nośnika SiO_2 na wielkość formowanych krystalitów Co_3O_4 . Dla układów, w których faza Co_3O_4 była zlokalizowana wewnątrz mezoporowatej struktury nośnika, stwierdzono zależność pomiędzy temperaturą początku redukcji (H_2 -TPR) a rozmiarem krystalitów - większe krystality ulegały redukcji w wyższej temperaturze. Zależność ta nie przekładała się jednak wprost na aktywność katalityczną w procesie dopalania toluenu, dla której obserwowano odwrotny trend. Jest to szczególnie interesujące, ponieważ badania *in situ* DRIFT wskazały na przebieg reakcji zgodny z mechanizmem Marsa-van Krevlena, w którym kluczową rolę odgrywa cykliczna wymiana tlenu sieciowego w fazie Co_3O_4 . Zatem, w przypadku klasycznych mezoporowatych nośników SiO_2 szybkość reakcji może być ograniczana przez dostęp reagentów do centrów aktywnych zlokalizowanych wewnątrz kanałów, pomimo korzystnych właściwości redoksowych fazy aktywnej. Ograniczenie to jest minimalizowane w przypadku $@\text{mSiO}_2$, którego unikalna architektura zapewnia jednocześnie wysoką dyspersję Co_3O_4 , efektywny transport reagentów oraz dostęp do reaktywnych centrów kobaltowych.

Praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Nauki w ramach grantu nr 2020/39/D/ST5/02703.



S02 KS05

Wykorzystanie popiołu z łusek ryżowych jako źródła SiO₂ do wytwarzania nośników katalizatorów metanizacji CO₂

Tomasz Piechówka, Agnieszka Szymaszek-Wawryca, Monika Motak

Afiliacja; AGH w Krakowie

adres korespondencyjny; ul. Łaskiewicza 8A/99 31-445 Kraków

e-mail: tpiechowka@student.agh.edu.pl

Emisja dwutlenku węgla (CO₂) do atmosfery jest jednym z głównych zagrożeń dla środowiska, prowadząc do nasilenia niekorzystnego efektu cieplarnianego i globalnych zmian klimatycznych. Skuteczną metodą chemicznego zagospodarowania tego gazu jest proces metanizacji ($\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 \rightleftharpoons \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$), który do wydajnego przebiegu wymaga zastosowania odpowiedniego katalizatora [1]. Najwyższą aktywność w tej reakcji wykazują układy zawierające metale szlachetne, jednak ze względu na ich wysoki koszt w praktyce powszechnie stosuje się znacznie tańszy nikiel [2]. Fazę metaliczną należy nanieść na materiał o rozwiniętej powierzchni, a ponieważ komercyjne nośniki są drogie, doskonałą alternatywą jest zagospodarowanie odpadowych łusek ryżowych. Stanowią one bogate i ekologiczne źródło krzemionki (SiO₂), która jest powszechnie cenionym i efektywnym nośnikiem dla niklowych katalizatorów metanizacji CO₂ [3].

Celem prezentowanych badań jest ocena możliwości wykorzystania popiołu z łusek ryżowych (RH) jako ekologicznego źródła nośnika krzemionkowego (SiO₂) katalizatorów metanizacji CO₂. Prace badawcze podzielono na trzy etapy: (1) określenie optymalnego stężenia HNO₃ (0,5 M, 1 M oraz 2 M) do aktywacji chemicznej łusek w celu efektywnego usunięcia zanieczyszczeń alkalicznych i zwiększenia powierzchni właściwej, (2) synteza serii niepromowanych katalizatorów zawierających 20% wag. niklu, wykorzystując trzy metody syntezy: ucieranie nośnika z prekursorem niklu w fazie stałej, syntezę spalenią oraz suchą impregnację, (3) charakterystyka wybranych właściwości fizykochemicznych za pomocą różnych metod (sorpccja N₂, XRD, H₂-TPR oraz SEM) oraz przeprowadzenie testów katalitycznych metanizacji CO₂. Dla najkorzystniejszego układu przeprowadzono testy stabilności. Najaktywniejsza próbka została promowana cerem (10% wag.), wprowadzonym metodą suchej impregnacji. Dodatkowo analiza XRD katalizatorów po testach stabilności pozwoliła na pełną ocenę wpływu promotora na żywotność układu.

The authors gratefully acknowledge financial support from the National Science Centre, Poland, through the OPUS 29 grant (grant no. 2025/57/B/ST5/01462). The selected results presented herein were developed using equipment supported by the "Excellence Initiative – Research University" programme at AGH University of Krakow.

- [1] P. Frontera, A. Macario, M. Ferraro, P.L. Antonucci, Supported catalysts for CO₂ methanation: A review, *Catalysts* 7 (2017) 59. <https://doi.org/10.3390/catal7020059>.
- [2] W. Gac, W. Zawadzki, M. Rotko, M. Greluk, G. Słowik, G. Kolb, Effects of support composition on the performance of nickel catalysts in CO₂ methanation reaction, *Catal. Today* 357 (2020) 222–233. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2019.07.026>.
- [3] Y. Yu, et al., Preparation of sustainable Ni/SiO₂ catalysts from rice husk by different methods for CO₂ methanation, *ChemSusChem* 18 (2025) e202401514. <https://doi.org/10.1002/cssc.202401514>.

Synteza i charakterystyka nowych związków iminowych oraz kompleksów cynku(II)

i miedzi(II) jako prekursorów materiałów fluorescencyjnych

^aMagdalena Barwiołek, ^aDebleena Mandal, ^aDominika Jankowska, ^aTadeusz M. Muzioł, ^bRoman Viter, ^bIryna Tieplakova, ^aAnna Kaczmarek Kędziera, ^cŁukasz Skowroński, ^dMonika Pokładko-Kowar, ^dEwa Gondek, ^eYuriy Zorenko, ^ePaweł Popielarski

^aUniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu; ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń, Polska,

^bFaculty of Science and Technology, Institute of Atomic Physics and Spectroscopy, University of Latvia, Jelgavas Str. 3, Riga, LV 1004, Łotwa,

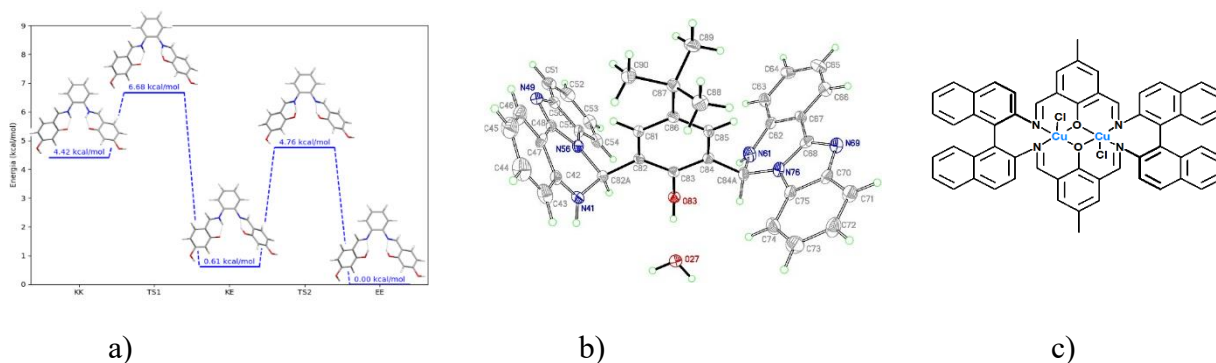
^dWydział Fizyki, Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Podchorążych 1, 30-084 Kraków, Polska;

^eInstytut Fizyki, Uniwersytet Kazimierza Wielkiego, Chodkiewicza 30, 85-064 Bydgoszcz, Polska
mbarwiolek@umk.pl

Związki iminowe, w szczególności zasady Schiffa oraz pochodne benzimidazolowe, stanowią interesującą grupę materiałów ze względu na ich właściwości koordynacyjne, fotofizyczne i możliwość modyfikowania właściwości emisyjnych poprzez odpowiednią funkcjonalizację struktury.

Wyizolowano nowe wielodonorowe ligandy makrocycliczne, pochodne benzimidazolowe zawierające podstawniki o zróżnicowanych właściwościach elektronowych oraz kompleksy Zn(II) i Cu(II). Strukturę otrzymanych związków potwierdzono z wykorzystaniem metod spektroskopowych, analizy elementarnej, termicznej i rentgenowskiej analizy strukturalnej. Charakter oddziaływań międzycząsteczkowych określono na podstawie analizy powierzchni Hirshfelda, natomiast właściwości strukturalne i optyczne wsparto obliczeniami metodami DFT.

Badano właściwości fotoluminescencyjne otrzymanych związków w roztworze i stanie stałym oraz wpływ struktury chemicznej, rodzaju podstawnika i koordynacji jonów metali na właściwości emisyjne. Dla wybranych pochodnych benzimidazolowych zbadano możliwość wykorzystania ich jako materiałów emitujących, uwzględniając procesy związane z wewnątrzcząsteczkowym transferem protonu w stanie wzbudzonym (ESIPT). Otrzymane związki wykorzystano do przygotowania cienkich warstw metodami spin coating oraz termicznego osadzania z fazy gazowej, a następnie scharakteryzowano ich morfologię i właściwości optyczne. Badano również właściwości sensoryczne wybranych liganów w stosunku do jonów metali.



Rysunek 1. Poziomy energii tautomerów **L1** w modelu B97X-D/def2-TZVP/PCM(etanol), b) ORTEP **L2**, schemat struktury **K1**.

Podziękowania: Badania finansowane częściowo przez projekt Horizon Europe-the Framework Programme for Research and Innovation (2021-2027), HE-MCSA-RISE-2022, 101086364.

Niekoordynujące pochodne pirydyny w związkach koordynacyjnych Sm(III), Eu(III) i Tb(III) – badania strukturalne i spektroskopowe

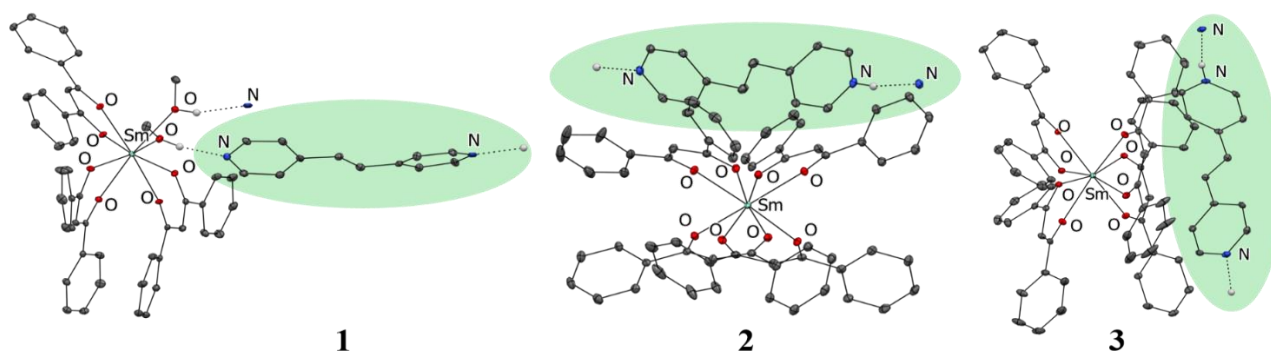
Bartosz Cieśla^a, Kacper Paszczyk^b, Radosław Kamiński^b, Katarzyna N. Jarzemska^b,
Agnieszka Pladzyk^a

^aKatedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk. e-mail: bartosz.ciesla@pg.edu.pl

^bWydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, ul. Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warszawa

Jednym z głównych kierunków badań w chemii koordynacyjnej jest poszukiwanie nowych prekursorów materiałów wielofunkcyjnych wykazujących właściwości magnetyczne, luminescencyjne czy też katalityczne. (1-3) Związki oparte na jonach lantanowców na +III stopniu utlenienia znajdują w tym obszarze swoje miejsce z uwagi na swoje unikalne właściwości. Dobór odpowiednich ligandów *N*-, *O*- oraz *S*-donorowych jest kluczowy dla ustabilizowania centrum metalicznego i generowania w ten sposób pożądaných cech związku kompleksowego.

Seria nowych związków Sm(III), Eu(III) oraz Tb(III) zawierających reszty 1,3-difenylopropano-1,3-dionianowe (dbm⁻) została zsyntezowana w ramach aktualnie prowadzonych badań. Związki otrzymano w postaci monokrystalicznej, a badania XRD wykazały, że wszystkie zawierają rdzeń o wzorze LnO₈ i geometrii antypryzmatu kwadratowego (Rysunek 1.). Otrzymane układy są dodatkowo stabilizowane obojętnymi lub sprotonowanymi cząsteczkami pochodnych pirydyny: 1,2-di(4'-pirydylo)etenu (bpey) oraz 1,2-di(4'-pirydylo)etanu (bpea).



Rysunek 1. Struktury molekularne wybranych związków [Sm(dbm)₃(CH₃OH)₂]·bpey (1), bpeyH[Sm(dbm)₄] (2) oraz bpeaH[Sm(dbm)₄] (3).

Zastosowanie metod DFT pozwoliło na dokładne zbadanie natury tworzących się oddziaływań niekowalencyjnych.

Obliczenia wykonano z wykorzystaniem komputerów Centrum Informatycznego Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej. Pomiary strukturalne wykonano na Wydziale Fizyki Uniwersytetu Warszawskiego, na dyfraktometrze Rigaku Oxford Diffraction SuperNova, którego zakup był współfinansowany przez Unię Europejską w ramach Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego (POIG.02.01.00-14.122/09).

- (1) C. Ruiz *et al.* *CrystEngComm*, 2019, 21, 3881.
- (2) A. K. Singh, *Coord. Chem. Rev.* 2022, 455, 214365.
- (3) R. Jankowski *et al.* *Chem. Commun.* 2023, 59(40), 5961-5986.

Korelacja struktury i właściwości spektroskopowych płasko-kwadratowych dikarbonylowych kompleksów rodu(I)

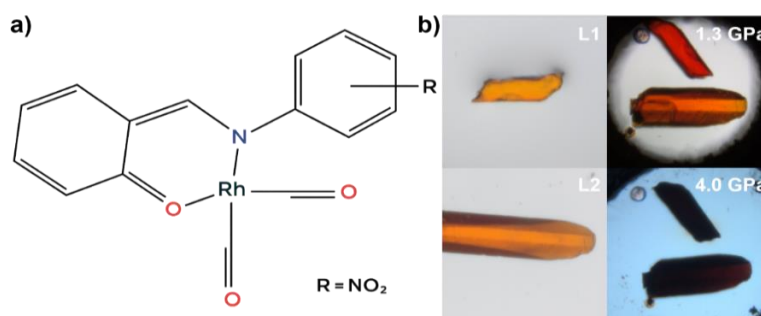
Kacper Paszczyk, Vitali Stsiapura, Kinga Potempa, Radosław Kamiński, Katarzyna N. Jarzemska

Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego
 ul. Żwirki i Wigury 102, 02-089 Warszawa
 k.paszczyk@student.uw.edu.pl

Kompleksy metali przejściowych mogą wykazywać interesujące właściwości fotofizyczne, które w stanie stałym są często silnie zależne od oddziaływań międzycząsteczkowych, w tym oddziaływań metalofilowych [1,2]. Celem projektu było zbadanie dwóch nowych dikarbonylowych kompleksów rodu(I) z ligandem typu zasady Schiffa zawierających grupę nitrową w pozycji para (L1) oraz meta (L2) (Rys.1a).

Związek L1 krystalizuje w grupie przestrzennej $P1^-$, a obniżenie temperatury nie powoduje jakościowych zmian struktury. Z kolei L2 w temperaturze pokojowej krystalizuje w grupie $P2_1/c$, a w jego strukturze krystalicznej można wyróżnić kolumny stabilizowane oddziaływaniami $\pi-\pi$ oraz metalofilowymi ($Rh \cdots Rh$). Poniżej temperatury około 240 K obserwuje się zróżnicowanie odległości $Rh \cdots Rh$ między cząsteczkami w kolumnach, a w konsekwencji obniżenie symetrii do $P1^-$. Odległości między atomami metalu, zarówno w dimerach dla L1, jak i w stosach dla L2, są krótsze od sumy promieni van der Waalsa. Pomiary absorpcji UV-Vis wykonane dla monokryształów w temperaturze pokojowej i ciśnieniu atmosferycznym wykazały, że pasmo absorpcji związku L2 jest przesunięte ku czerwieni względem L1 oraz wykazuje zależność od polaryzacji światła (~ 530 nm). Efekt ten można wiązać z obecnością jednowymiarowych motywów strukturalnych stabilizowanych oddziaływaniami metalofilowymi. Badania absorpcji przeprowadzono również dla monokryształów obu związków umieszczonych w kowadełkach diamentowych. Zaobserwowano wyraźne przesunięcie pasm absorpcyjnych ku czerwieni, czemu towarzyszyła zmiana barwy kryształów z pomarańczowej na czarną (Rys. 1b).

Planowane są dalsze badania, obejmujące pomiary dyfrakcji rentgenowskiej kryształów w warunkach wysokiego ciśnienia oraz obliczenia teoretyczne, które pozwolą na bardziej szczegółową analizę zależności między właściwościami spektroskopowymi, a strukturą badanych kompleksów.



Rys. 1. a) Schematyczne przedstawienie badanych związków b) Badane kryształy na szkiełku mikroskopowym oraz w komorze diamentowej podczas badań absorpcji UV-VIS.

Podziękowania dla grantu SONATA BIS (grant 2020/38/E/ST4/00400) za wsparcie finansowe oraz WCSS za udostępnienie zasoby obliczeniowe.

Literatura

- [1] Slinker, Jason et al. Chem. Commun., 2003, 9, 2392
- [2] Syamala, Vishnu, et al. J. Mater. Chem., 2025, 13, 15634-15644.

Makrocykliczne chemosensory z jednostką antrachinonową – kompleksowanie wybranych jonów metali

Dorota Zarzeczńska, Sandra Brzeska, Jakub Brzeski

Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk,
 dorota.zarzeczanska@ug.edu.pl

Chemosensory makrocykliczne, w których jednostka antrachinonowa stanowi integralny element wnętrza kompleksującej oraz pełni funkcję chromoforu sygnalizującego proces wiązania jonów metali, są interesującą grupą receptorów do ich selektywnego rozpoznawania. Celem pracy było zbadanie właściwości kompleksujących ligandów AQ-Ncrown i AQ-Ncrypt wobec jonów Mg^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} i Al^{3+} z wykorzystaniem spektrofotometrii UV–Vis.

Analiza miereczkowań spektrofotometrycznych wykazała tworzenie kompleksów o stechiometrii ML i ML_2 , a wyznaczone stałe trwałości zależały zarówno od rodzaju jonu metalu, jak i budowy receptora. Procesowi kompleksowania towarzyszyły wyraźne zmiany barwy roztworów oraz charakterystyczne zmiany w widmach absorpcyjnych, świadczące o reorganizacji elektronowej w obrębie jednostki antrachinonowej (Rysunek 1). Największą trwałość stwierdzono dla kompleksów z jonami Zn^{2+} i Al^{3+} , natomiast najmniejszą dla kompleksów z jonami Mg^{2+} . Otrzymane wyniki wskazują, że zarówno architektura makrocyklu, jak i równowaga pomiędzy jego preorganizacją i elastycznością mają istotny wpływ na trwałość tworzonych kompleksów. Uzyskane wyniki mogą stanowić podstawę do projektowania nowych makrocyklicznych chemosensorów o zwiększonej selektywności wobec jonów metali.



Rysunek 1. Efekty barwne obserwowane dla roztworu AQ-Ncrypt w acetonitrylu w obecności nadmiaru soli wybranych metali.

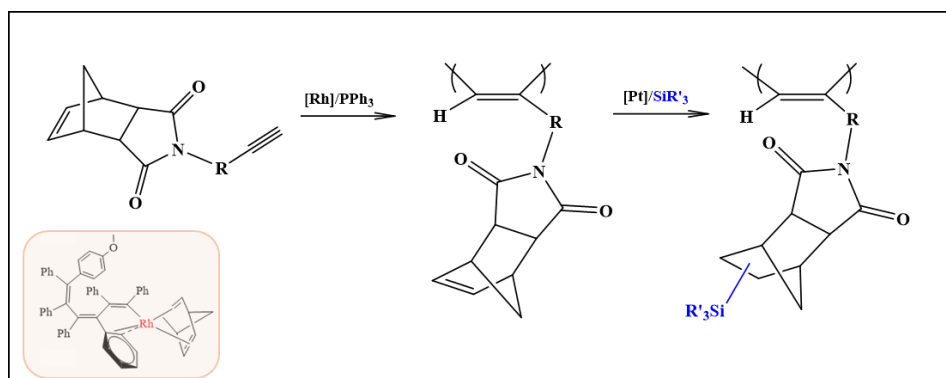
Kontrolowana polimeryzacja alkinów zawierających dodatkowe grupy norborn-5-en-dikarboksyimidowe

Izabela Czelusniak^{a)}, Mariusz Majchrzak^{b)}

^{a)}Wydział Chemii Uniwersytet Wrocławski, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, izabela.czelusniak@uwr.edu.pl.

^{b)} Wydział Chemii Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań mariusz.majchrzak@amu.edu.pl

Funkcjonalizowane poliacetyleny są dynamicznie rozwijającą się grupą materiałów inteligentnych o szerokich perspektywach aplikacyjnych m. in. w fotonice, separacji gazów oraz biomedycynie. W przeciwieństwie do niepodstawionego poliacetylenu, obecność bocznych grup funkcyjnych umożliwia precyzyjne dostrajanie właściwości matrycy polimerowej. Odpowiedni dobór monomerów, katalizatorów oraz warunków prowadzenia polimeryzacji, która pozwala na kontrolowanie masy cząsteczkowej, składu oraz struktury otrzymywanych polimerów, wciąż stanowi jednak poważne wyzwanie syntetyczne. W oparciu o najnowsze doniesienia literaturowe alkinury aryłowe ulegają kontrolowanej polimeryzacji w obecności trójskładnikowego katalizatora rodowego.⁶ Te obiecujące wyniki zainspirowały nas do przetestowania aktywności tego kompleksu w polimeryzacji szeregu alkinów zawierających reaktywne grupy norborn-5-en-dikarboksyimidowe (rysunek).



W komunikacie zaprezentowana zostanie metoda syntezy polimerów i kopolimerów opartych na poliacetylenie, która pozwala na pełną kontrolę struktury i długości łańcuchów polimerowych oraz składu kopolimerów. Natomiast zastosowanie kontrolowanej reakcji sililowania wiązania podwójnego w grupach norborn-5-en-dikarboksyimidowych (ko)polimeru umożliwi wprowadzenie zakładanej ilości grup krzemowych do (ko)polimeru w łagodnych warunkach, co prowadzi do zwiększenia m. in. rozpuszczalności i polarności materiału.

Podziękowanie: Prezentowane badania zostały sfinansowane dzięki wsparciu Narodowego Centrum Nauki w ramach grantu o nr. UMO-2024/53/B/ST5/03556.

⁶ Taniguchi T., Yoshida T., Echizen K., Takayama K., Nishimura T., Maeda K., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 8670-8680.; Echizen, K.; Taniguchi, T.; Nishimura, T.; Maeda, K., *Angew Chem Int Ed* **2022**, 61, e202202676.



S02 KS11

Kompleksowe przetwarzanie popiołów lotnych ze spalania ciężkich frakcji ropy naftowej jako przykład gospodarki o obiegu zamkniętym

Włodzimierz Urbaniak¹, Małgorzata Olejarczyk¹, Mateusz Cymański²

¹Wydział Chemii UAM; ²Re-Solve sp. z o.o. Malbork
adres korespondencyjny: wlodzimierz.urbaniak@amu.edu.pl

Popioły lotne, określane zazwyczaj jako HOFA – (ang. Heavy Oil Fly Ash), powstają w zakładach energetycznych wykorzystujących jako paliwo ciężkie frakcje ropy naftowej, w tym ciężki olej opałowy (mazut). Spalenie 1 m³ oleju opałowego generuje ok. 2,5 – 3 kg popiołu lotnego w postaci bardzo lekkiego pyłu, składającego się głównie z niespalonego węgla, siarki oraz związków metali ciężkich, głównie wanadu i niklu. Ze względu na skład i właściwości, popioły HOFA są klasyfikowane jako odpady niebezpieczne i po zestaleniu/stabilizacji są składowane lub przetwarzane metodami pirometalurgicznymi, co generuje znaczne emisje CO₂. Wszystkie dotychczas znane technologie przetwarzania popiołów HOFA, koncentrują się na odzysku metali, głównie wanadu oraz niklu i praktycznie w ogóle nie zajmują się problemem wykorzystania pozostałości węglowej [1].

Firma Re-Solve we współpracy z Wydziałem Chemii UAM opracowała i opatentowała technologię przetwarzania popiołów HOFA w kierunku selektywnego odzysku pyłu węglowego oraz surowców krytycznych w postaci związków wanadu i niklu, przy praktycznie całkowitej eliminacji negatywnego wpływu na środowisko [2].

W pierwszym etapie z popiołu wypłukiwane są wszystkie składniki rozpuszczalne w kwasach. Opracowany innowacyjny proces wykorzystuje kwas siarkowy (IV) i (VI) otrzymany ze związków siarki zawartych w popiele, co znacznie ogranicza zużycie kwasu siarkowego dostarczanego z zewnątrz. Pozostały po płukaniu nierozpuszczalny osad, stanowiący około 50 % wyjściowego popiołu HOFA, składa się głównie z silnie zdyspergowanego węgla, który może być wykorzystany jako specjalistyczny, wysokowartościowy produkt. Dotychczasowe badania wykazały, że nadaje się do bezpośredniego zastosowania jako aktywny napełniacz i pigment w kompozytach polimerowych [3], lub jako selektywny sorbent zanieczyszczeń organicznych [4]. Istotą opracowanej technologii jest selektywne wyodrębnianie poszczególnych składników z roztworu płuczącego. W odróżnieniu od znanych metod, wanad nie jest wytrącany z roztworu za pomocą związków amonowych, w końcowym etapie po wytrąceniu innych metali, ale selektywnie wydzielany w postaci tlenków, już w pierwszym etapie [5].

W kolejnych etapach, za pomocą alkaliów są selektywnie wytrącane pozostałe metale, m.in. żelazo, nikiel, a następnie siarczany w postaci gipsu charakteryzującego się wysoką bielą, dzięki czemu może być składnikiem zapraw stosowanych w budownictwie. Dzięki oryginalnemu systemowi płukania, wytrącania metali i oczyszczania wód płuczających w urządzeniach membranowych, zużyta woda jest zwracana do procesu (zamknięty obieg wody z wytworzeniem solanki). W efekcie technologia praktycznie nie generuje żadnych ścieków, a wszystkie otrzymane w procesie materiały są wartościowymi produktami do dalszych zastosowań przemysłowych.

1. *Recovery of vanadium and nickel from heavy oil fly ash (HOFA): a critical review* RSC Adv., 2023, 13, 6327, DOI: 10.1039/d3ra00289f;
2. *Sposób przetwarzania popiołów lotnych ze spalania produktów z ropy naftowej*, Pat. PL 248970;
3. *Napełniacz, zwłaszcza do termoplastycznych tworzyw sztucznych i sposób jego otrzymywania*, Pat. PL 245233;
4. *The Removal of Azoles from an Aqueous Solution by Adsorption on Nature-Derived and Waste Materials*, Processes 2025, 13, 3197. <https://doi.org/10.3390/pr13103197>;
5. *A method of management of flyashes from the combustion of petroleum products*, PCT/PL2023/050059, EP4558551A1.



S02 KS12

Hydrotalkity niklowo-glinowo-kobaltowe jako prekursorzy katalizatorów metanizacji ditlenku węgla

Katarzyna Bania, Bogdan Samojeden, Monika Motak

AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, Wydział Energetyki i Paliw
Al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków;
e-mail bsamol@agh.edu.pl

Metanizacja ditlenku węgla stanowi perspektywiczny kierunek jego chemicznego zagospodarowania oraz jeden z elementów technologii Power-to-Gas, umożliwiającej konwersję energii ze źródeł odnawialnych do postaci syntetycznego metanu. Celem pracy było otrzymanie i scharakteryzowanie materiałów hydrotalkitowych zawierających nikiel, glin i kobalt oraz ocena ich aktywności w reakcji Sabatiera.

Metodą współstrącania przygotowano pięć próbek o zróżnicowanym składzie molowym metali, które następnie poddano prażeniu. Właściwości fizykochemiczne otrzymanych materiałów określono z wykorzystaniem adsorpcji azotu metodą BET, proszkowej dyfrakcji rentgenowskiej XRD oraz spektroskopii FTIR. Badania katalityczne przeprowadzono w reaktorze przepływowym w zakresie temperatur 250-450°C, przy jednakowym składzie i natężeniu przepływu mieszaniny reakcyjnej.

Otrzymane materiały charakteryzowały się mezoporowatą strukturą oraz obecnością powierzchniowych grup hydroksylowych i węglanowych, sprzyjających adsorpcji CO₂. Analiza XRD wykazała powstawanie po prażeniu faz tlenkowych NiO, Co₃O₄, CoO i Al₂O₃ oraz, w wybranych próbkach, faz spinelowych. Wszystkie katalizatory wykazywały wysoką selektywność w kierunku metanu. Najwyższą aktywność uzyskano dla materiału o składzie Ni/Al = 0,75/0,25. W temperaturach 250-300°C stopień konwersji CO₂ wynosił około 85%, przy selektywności do CH₄ bliskiej 100%. Zwiększenie zawartości kobaltu sprzyjało tworzeniu trudniej redukowalnych faz spinelowych i prowadziło do obniżenia aktywności katalitycznej. Wyniki wskazują, że hydrotalkity niklowo-glinowe są obiecującymi prekursorami katalizatorów niskotemperaturowej metanizacji CO₂, a ich właściwości można kształtować poprzez kontrolę składu i parametrów syntezy.



S02 KS13

Learning from complexity and failures: several reaction pathways involving AgF_2

Shukdev Pandey, Wojciech Grochala

*Centre of New Technologies, University of Warsaw,
Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warsaw, Poland
e-mail s.pandey@cent.uw.edu.pl*

Chemistry of divalent silver is restricted to ligands which may withstand (at least kinetically) the oxidizing power of this cation [1]. Thus, fluoro- and oxo- connections predominate in this field. To further extend this domain and explore the possibilities of exotic magnetism and superconductivity, we have targeted several new stoichiometries, and we have studied the obtained phases using powder x-ray diffraction and Raman spectroscopy.

Preparation of $\text{K}_2\text{Ag(II)(SO}_4)_2$ was attempted via the solid-solid reaction at elevated temperature between KHSO_4 and AgF_2 . The initial surmise was that the acidity of the bisulphate anion is sufficient to induce evolution of gaseous HF from the samples. Unfortunately, since $\text{Ag(I)}_2\text{SO}_4$, traces of Ag(I)HF_2 , and elemental Ag were the only crystalline Ag-containing products, it could be deduced that the targeted composition is unstable, and additionally the Ag(I) byproducts are photosensitive and degrade to Ag(0).

The attempts of synthesis of $(\text{NH}_4)\text{AgF}_3$ perovskite using NH_4HF_2 and AgF_2 reagents at room temperature and up to 50°C resulted in the redox reaction with AgF as the only Ag-containing product. This result suggests the formation of NF_3 or related products.

Thermal reactions between beryllium (II) fluoride [2] and either AgF or AgF_2 at temperatures up to 250°C (FEP reactor) or up to 300°C (Nickel-Copper [Monel 400] reactor) yielded no new crystalline phases.

The next attempt was to achieve Ag(II)SeO_4 as an analogue of the known AgSO_4 via the reaction between AgF_2 and H_2SeO_4 [3]. Since crystalline H_2SeO_4 precursor is not available commercially as the pure phase, we attempted to prepare pure selenic(VI) acid by concentrating the dilute solutions. To our surprise, H_2SeO_4 easily decomposes yielding H_2SeO_3 and further SeO_2 . It turns out that use of O_2 or ozone could not hinder this undesired process. This result shows a marked and highly atypical difference between the chemistries of sulphur and selenium, which is rarely discussed in the literature. Regretfully, this also negatively impacts our attempts to prepare Ag(II)SeO_4 .

[1] W.Grochala, J. Fluor. Chem 129 (2008) 82-90.

[2] W. Grochala, A. Porch, P.P. Edwards, Solid State Commun. 130 (2004) 137-142.

[3] P. J. Malinowski, M. Derzsi, Z. Mazej, Z. Jagličić, B. Gawel, W. Łasocha and W. Grochala, Angew. Chem., Int. Ed., 49 (2010) 1683 -1686.



S02 KS14

Nowe bimetaliczne kompleksy Ir(III)–Au(I) o właściwościach luminescencyjnych

Michał Łomzik, Damian Plażuk

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej;
ul. Tamka 12, 91-403 Łódź;
e-mail: michal.lomzik@chemia.uni.lodz.pl

Luminescencyjne kompleksy metali przejściowych stanowią intensywnie rozwijaną grupę związków o potencjalnym zastosowaniu w optoelektronice, sensorach chemicznych oraz obrazowaniu biologicznym. Szczególne znaczenie w tym obszarze mają kompleksy irydu(III), których właściwości fotofizyczne wynikają m.in. z obecności ciężkich atomów, efektywnego sprzężenia spinowo-orbitalnego oraz możliwości precyzyjnej modyfikacji środowiska koordynacyjnego.

Metaloorganiczne kompleksy irydu(III) wykazują intensywną emisję ze stanów tripletowych, której energia i charakter mogą być regulowane poprzez odpowiedni dobór ligandów, natomiast kompleksy złota(I), w szczególności kompleksy acetylenkowe, charakteryzują się silną zależnością luminescencji od upakowania krystalicznego, oddziaływań międzycząsteczkowych oraz obecności oddziaływań aurofilowych $\text{Au}\cdots\text{Au}$. W przypadku kompleksów złota(I) istotnym zjawiskiem wpływającym na ich strukturę i właściwości jest tzw. scrambling ligandów, czyli przegrupowanie prowadzące do powstawania nowych form jonowych. Zjawisko to obserwowano m.in. dla kompleksów typu $\text{Ar-CO-C}\equiv\text{C-Au-PEt}_3$, które w roztworze mogą przekształcać się w mieszaniny zawierające anionowe kompleksy bis(acetylenkowe) złota(I) oraz kationy $[\text{Au(PEt}_3)_2]^+$. [1, 2] Proces ten zależy od charakteru liganda acetylenkowego — obecność grupy karbonylowej zwiększa podatność układu na „scrambling”, prawdopodobnie przez zmianę właściwości donorowo-akceptorowych liganda. Ma to istotne znaczenie zarówno dla trwałości kompleksów w roztworze, jak i dla ich organizacji w fazie stałej, gdzie produkty takiego przegrupowania mogą tworzyć struktury stabilizowane oddziaływaniami aurofilowymi $\text{Au}\cdots\text{Au}$, wpływającymi na właściwości luminescencyjne materiału. [3]

W prezentacji przedstawione zostaną wyniki badań dotyczących syntezy oraz właściwości fotofizycznych nowych bimetalicznych kompleksów irydu(III) i złota(I). Szczególna uwaga zostanie poświęcona wpływowi przegrupowania ligandów, określanego jako scrambling, na strukturę badanych układów oraz ich właściwości emisyjne. Omówiona zostanie zależność między budową kompleksów, a ich luminescencją, ze szczególnym uwzględnieniem wpływu modyfikacji strukturalnych na położenie maksimum emisji, wydajność kwantową oraz czas życia stanu wzbudzonego. Uzyskane wyniki mogą stanowić podstawę do racjonalnego projektowania nowych materiałów luminescencyjnych o kontrolowanych właściwościach optycznych.

(1) Głodek, M.; et al. *Dalton Transactions* **2018**, 47 (19), 6702-6712.

(2) Głodek, M.; et al. *Chemistry – A European Journal* **2019**, 25 (57), 13131-13145.

(3) Dziewiątkowska, R.; et al. *Dalton Transactions* **2025**, 54 (8), 3362-3374.

Żelazo na drodze do metatezy: jak stan spinowy decyduje o (dez)aktywacji katalizatora

Katarzyna Młodzikowska-Pieńko,^{1,2} Jatin Panda,² Subhash Garhwal,² Alexander Kaushansky,² Tobias Krämer,² Renana Gershoni-Poranne,² Graham de Ruiter²

¹*Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk, Warszawa, Polska;*

²*Wydział Chemii Schulich, Izraelski Instytut Techniczny Technion, Hajfa, Izrael*

adres korespondencyjny Instytut Chemii Organicznej Polskiej Akademii Nauk,

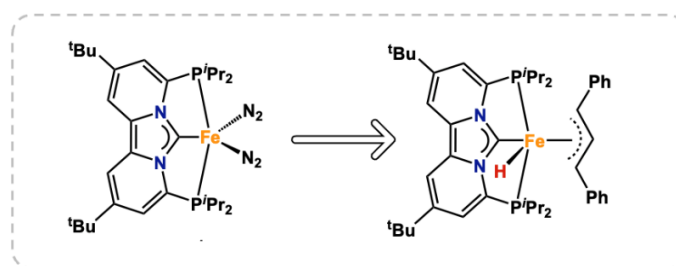
ul. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa;

e-mail: Katarzyna.mlodzikowska-pienko@icho.edu.pl

Metateza alkenów katalizowana przez metale powszechnie występujące w przyrodzie jest atrakcyjną alternatywą dla układów opartych na rutenie, molibdenie i wolframie.(1) Szczególnie interesującym kandydatem jest żelazo ze względu na niski koszt i znikomą toksyczność.(2) Niestety, kompleksy katalityczne oparte na żelazie są rzadkością, z uwagi na ich słabą wydajność i słabo poznaną reaktywność.(3)

W niniejszej pracy podjęto się analizy reaktywności kluczowego półproduktu metatezy- metalacyklobutanu (MCB), którego los decyduje o produktywniej bądź nieproduktywnej przemianie. Połączenie prac eksperymentalnych z dogłębną analizą obliczeniową w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT), wykazały, że reakcja, przypuszczalnie, może przebiegać na trzech różnych powierzchniach energii potencjalnej (PES ang. *Potential Energy Surface*) w różnym stanie spinowym, prowadząc do dezaktywacji aktywnego katalitycznie kompleksu (*Rysunek 1*). Przeprowadzone eksperymenty potwierdziły zaproponowany mechanizm oraz wykluczyły alternatywne ścieżki rozpadu.(4)

Synergistyczne połączenie chemii obliczeniowej z eksperymentami, pozwoliło określić modulujący wpływ substratów na przebieg reakcji oraz kluczowe produkty pośrednie i ich stan spinowy.



Rysunek 1. Schematyczne przedstawienie kompleksu żelaza i jego nieaktywnej formy

Przypisy:

1. R. M. Bullock *et al.*, *Science*. **369**, eabc3183 (2020).
2. K. M. P. Wheelhouse, R. L. Webster, G. L. Beutner, *Org. Process Res. Dev.* **27**, 1157–1159 (2023).
3. I. Bauer, H.-J. Knölker, *Chem. Rev.* **115**, 3170–3387 (2015).
4. K. Młodzikowska-Pieńko *et al.*, *Angew. Chem.* **137**, e202515731 (2025).



S02 KS16

Skalowanie preparatyki katalizatora do redukcji NO_x

– od laboratorium do skali pilotowej

Magdalena Saramok¹, Marek Inger^{1,2}, Anna Mrozek¹, Katarzyna Antoniak-Jurak¹

¹*Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Nowych Syntez Chemicznych;
al. Tysiąclecia Państwa Polskiego 13A, 24-110 Puławy*

²*Akademia Górniczo-Hutnicza AGH; al. Adama Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
magdalena.saramok@ins.lukasiewicz.gov.pl;*

Rosnące wymagania dotyczące ograniczania emisji tlenków azotu z instalacji przemysłowych, w tym instalacji produkujących kwas azotowy, powodują konieczność opracowywania nowych, efektywnych i przyjaznych środowisku katalizatorów w tym m.in. do procesu selektywnej redukcji z wykorzystaniem amoniaku (SCR-NH₃).

Skalowanie poszczególnych operacji jednostkowych wytwarzania katalizatorów jest zwykle dużym wyzwaniem technologicznym. Ujawniają się wtedy problemy niemożliwe do identyfikacji w trakcie badań i prób preparatywnych prowadzonych w skali laboratoryjnej. Zwiększeniu skali wytwarzania towarzyszy zwykle problem braku możliwości właściwej kontroli warunków procesowych danej operacji jednostkowej, co skutkować może niehomogenicznością materiału katalitycznego prowadzącą do zmniejszonej jego efektywności. Zagadnienie to w sposób szczególny dotyczy katalizatorów projektowanych do aplikacji w procesach przemysłowych np. produkcji kwasu azotowego, które oparte byłyby na tanich i dostępnych materiałach pochodzenia naturalnego np. klinoptylolicie. Przedmiotem badań była weryfikacja założeń technologicznych wytwarzania nowego typu katalizatora SCR-NH₃ opartego na naturalnym klinoptylolicie modyfikowanego jonami żelaza 5%Fe/KLIN oraz identyfikacja i eliminacja problemów technologicznych związanych ze zwiększaniem skali poszczególnych operacji jednostkowych tj. modyfikacja klinoptylolitu, obróbka termiczna oraz formowanie materiału katalitycznego w funkcjonalne kształtki.

W pracy omówiono wyniki badań nad kompleksową charakterystyką materiału katalitycznego obejmującą: skład chemiczny (XRF), skład fazowy (XRD) oraz wybrane parametry struktury porowatej. Wszechstronnej charakterystyce poddano także finalny katalizator zarówno przed jak i po testach aktywności w warunkach odpowiadających warunkom przemysłowego procesu NH₃-SCR w celu oceny ewentualnych zmian właściwości fizykochemicznych w warunkach testowych (skład chemiczny i fazowy, stabilność struktury, powierzchnia właściwa oraz objętość i rozkład wielkości porów). Kluczowym elementem badań pozwalającym na ostateczną weryfikację wpływu skalowania wytwarzania katalizatora na jego efektywność były testy aktywności nowego katalizatora w procesie NH₃-SCR w szerokim zakresie temperatury (300-430 °C), zróżnicowanym natężeniu przepływu oraz składzie gazów procesowych.

Analiza wyników badań wykazała, że wraz ze zwiększaniem skali wytwarzania materiału katalitycznego kluczowym wyzwaniem staje się optymalizacja parametrów procesu formowania, w tym dobór odpowiedniej siły nacisku oraz rodzaju i ilości plastifikatora.

Materiał katalityczny otrzymany w ilości 20 kg okazał się układem o wysokiej zgodności składu i parametrów fizykochemicznych w porównaniu z referencyjnym układem zsyntetyzowanym w skali laboratoryjnej. Uzyskany katalizator Fe/KLIN w formie tabletek (8 mm x 3,7 mm) jest układem o wysokiej aktywności (>90% konwersji NO_x) w reakcji NH₃-SCR trwałej w warunkach procesu przemysłowego.



S02 KS17

Wpływ formuły katalizatora i hydrodynamiki przepływu gazu w reaktorze SCR na efektywność oczyszczania gazów resztkowych z NO_x

Monika Ruszak^{*1}, Katarzyna Antoniak-Jurak¹, Magdalena Saramok¹, Paweł Capała¹, Jakub Rajewski¹, Anna Mrozek¹, Marek Inger^{1,2}

¹*Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Nowych Syntezy Chemicznych, Al. Tysiąclecia Państwa Polskiego 13a, 24-110 Puławy*

²*AGH Akademia Górniczo-Hutnicza, ul. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków*

**monika.ruszak@ins.lukasiewicz.gov.pl*

Gazy resztkowe po procesie wytwarzania kwasu azotowego(V) mogą zawierać, w zależności od parametrów operacyjnych kolumny absorpcyjnej oraz sezonowych warunków eksploatacyjnych, od 0,65 do 10 kg NO_x /tonę 100% HNO_3 . Za najbardziej efektywną i zgodną z konkluzjami BAT technologię oczyszczania gazów resztkowych z NO_x w instalacjach produkcji HNO_3 uznaje się selektywną katalityczną redukcję przy użyciu amoniaku (NH_3 -SCR). Umożliwia ona obniżenie stężenia tlenków azotu w strumieniu gazu poniżej obowiązujących limitów emisji tj. <90 ppm dla instalacji istniejących oraz <75 ppm dla nowych lub zmodernizowanych.

Głównym celem badań było zaprojektowanie nośnikowego katalizatora do procesu NH_3 -SCR na osnowie układu Fe_2O_3 - Al_2O_3 (Fe-Al) promotowanego V_2O_5 [1]. Otrzymano dwa warianty katalizatora, na nośniku niemodyfikowanym (V_2O_5 /Fe-Al) i modyfikowanym CeO_2 (V_2O_5 - CeO_2 /Fe-Al). Zbadano wpływ obecności modyfikatora strukturalnego – CeO_2 , geometrii ziarna katalizatora (wyłoczeki $\phi 2$ mm, tabletki 5x5 mm i pierścienie Raschiga 5x5x2,5 mm) oraz hydrodynamiki przepływu gazów resztkowych w reaktorze SCR na efekt katalityczny oraz selektywność do N_2 . Badania aktywności katalizatorów w procesie NH_3 -SCR prowadzono w instalacjach badawczych Łukasiewicz – INS w strumieniu rzeczywistych gazów resztkowych, w reaktorach o średnicy 3 oraz 30 cm.

Układ Fe-Al wykazuje aktywność w kierunku procesu NH_3 -SCR i umożliwia uzyskanie 50-60% stopnia redukcji NO_x w zakresie temperatury 250-450°C. Jego modyfikacja V_2O_5 pozwala poprawić efekt katalityczny o 20-33 pkt. procentowe, dzięki synergistycznemu oddziaływaniu Fe^{3+} i V^{5+} . Modyfikacja układu Fe-Al tlenkiem ceru, przed osadzeniem fazy V_2O_5 , wpływa korzystnie na parametry mechaniczne katalizatora oraz zapobiega spiekaniu się fazy aktywnej w trakcie eksploatacji. Zaobserwowano również korzystny wpływ CeO_2 na aktywność i selektywność katalizatora do N_2 ($\geq 400^\circ\text{C}$). Zwiększenie powierzchni geometrycznej złoża katalizatora V_2O_5 /Fe-Al o ok. 30% poprzez zastosowanie form pierścieniowych zamiast tabletek pozwala na osiągnięcie zbliżonego lub nieznacznie większego efektu katalitycznego przy mniejszej o ok. 30% masie katalizatora. Rozwiązanie to pozwala na ograniczenie zużycia materiału katalitycznego, a tym samym przynosi wymierne korzyści ekonomiczne. Efektywność działania katalizatora modyfikowano również przez zmianę kierunku przepływu gazu przez jego złożo. Zastosowanie zmodyfikowanej konstrukcji kosza katalitycznego, w której klasyczny przepływ osiowy lub radialny zastąpiono układem osiowo-radialnym oraz rozwiązaniem kasetowym z radialnym rozplywem gazu, pozwala na zmniejszenie spadku ciśnienia gazu w reaktorze, a jednocześnie wpływa na stopień konwersji NO_x i selektywność do N_2 . Dobór odpowiedniej konstrukcji kosza katalitycznego pozwala również zminimalizować niekorzystne zjawiska hydrodynamiczne, tj. nierównomierne obciążenie złoża strumieniem gazu i jego bocznikowanie oraz tworzenie martwych stref w złożu.



S02 KS18

Synergia poprzez integrację odwodornienia lekkich alkanów z metatezą olefin

Mariya Myradova, Karolina Gałęziowska, Anna Rokicińska, Piotr Kuśtrowski, Piotr Michorczyk
Politechnika Krakowska, im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Katedra Chemii i Technologii Organicznej;
Politechnika Krakowska, im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Katedra Chemii i Technologii Organicznej, Warszawska 24, 31-155 Kraków, Polska
mariya.myradova@pk.edu.pl

Molibdenowy molibden (5% wag. $\text{MoO}_3/\text{SiO}_2$), otrzymany konwencjonalną metodą impregnacji „pierwszej wilgotności”, znajduje szerokie zastosowanie w reakcji metatezy olefin. W niniejszej pracy przeprowadzono jego aktywację w atmosferze lekkich alkanów - etanu, propanu i n-butanu - w zakresie temperatur 550-700°C oraz czasów kontaktu 1-120 min, wyznaczając dla każdego z alkanów optymalny zestaw parametrów zapewniający najwyższą aktywność metatezy. Zbadano ponadto zdolność katalizatora $5\text{MoO}_3/\text{SiO}_2$ do odwodornienia lekkich alkanów.

W celu weryfikacji hipotezy, że olefiny, powstające w trakcie odwodornienia mogą korzystnie wpływać na aktywność metatetyczną MoO_3 , do złoża katalitycznego wprowadzono dodatkowe złożo o funkcji odwodorniającej, oparte na tlenkach chromu, wanadu i galu. Zastosowanie dwufunkcyjnego układu katalitycznego pozwoliło uzyskać istotne korzyści procesowe: obniżenie temperatury aktywacji/dehydrogenacji, zwiększenie wydajności olefin na etapie dehydrogenacji oraz utrzymanie wysokiej konwersji propylenu w reakcji metatezy. Dodatkowo określono wpływ temperatury oraz obciążenia dwufunkcyjnego złoża na aktywność katalityczną takiego złoża.

Uzyskane wyniki wskazują na potencjał integracji procesów odwodornienia i metatezy jako podejścia umożliwiającego zwiększenie efektywności wytwarzania olefin z lekkich alkanów przy jednoczesnym ograniczeniu wymagań energetycznych procesu.



S02 KS19

Symulacja pracy przemysłowej instalacji absorpcji i destylacji amoniaku

Martyna Niżnik, Ewa Soszyńska-Sumorek

*Afiliacja: Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Nowych Syntezy Chemicznych
adres korespondencyjny: 24-110 Puławy, al. Tysiąclecia Państwa Polskiego 13a
e-mail: martyna.niznik@ins.lukasiewicz.gov.pl*

Sekcja absorpcji i destylacji (AD) jest jednym z ważnych elementów przemysłowych wytwórni amoniaku. Jej głównym zadaniem jest odzysk amoniaku zawartego w gazach podesorpcyjnych (z kolumny ekspansyjnej) oraz tzw. „purge-gazie” (z instalacji syntezy). W procesie tym otrzymuje się NH_3 oraz gaz poabsorpcyjny, który zwracany jest do instalacji przygotowania gazu syntezowego.

Gaz zasilający kolumnę absorpcyjną zawiera od około 7 do nawet 30% obj. amoniaku. W wyniku jego absorpcji w wodzie powstaje woda amoniakalna, która następnie jest rektyfikowana w kolumnie destylacyjnej. Gaz poabsorpcyjny, oczyszczony z amoniaku, jest wykorzystywany jako opał do produkcji wodoru, a produktem końcowym powstającym w węźle AD jest strumień czystego amoniaku, ciekłego lub gazowego (w zależności od potrzeb danego zakładu).

Podczas jednego z projektów realizowanych w Łukasiewicz-INS analizowano możliwość radykalnej zmiany pracy węzła absorpcji i destylacji przy jednoczesnym pozyskaniu znaczących ilości wodoru z „purge-gazu”. Wiązało się to z koniecznością zasymulowania pracy węzła o całkowicie zmodyfikowanej konfiguracji w porównaniu z dotychczasową.

W pracy przedstawiono wyniki symulacji układu początkowego wraz z porównaniem najważniejszych parametrów z rzeczywistymi danymi ruchowymi w celu walidacji metody obliczeniowej. Następnie przeprowadzono analizę pracy instalacji, w której kolumna absorpcyjna zasilana jest jedynie gazem pochodzącym z ekspansji amoniaku, a „purge-gaz” kierowany jest do sekcji odzysku wodoru na membranach.

W badaniach wykorzystano środowisko programu ChemCAD, który pozwolił w realistyczny sposób odwzorować pracę instalacji przemysłowej. Zaimplementowany model instalacji umożliwił analizę wpływu zmian, m.in. składu gazu zasilającego kolumnę absorpcyjną na pracę poszczególnych aparatów wchodzących w skład instalacji oraz zoptymalizowanie parametrów istotnych z punktu widzenia prowadzenia procesu technologicznego.



S02 KS20

Techniczne aspekty modernizacji kosza katalitycznego w reaktorze utleniania amoniaku w instalacji kwasu azotowego

Artur Olszak, Magdalena Saramok, Jakub Rajewski, Monika Ruszak, Marcin Wilk

*Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Nowych Syntez Chemicznych,
Al. Tysiąclecia Państwa Polskiego 13a, 24-110 Puławy,
artur.olszak@ins.lukasiewicz.gov.pl*

Podtlenek azotu (N_2O), który powstaje w procesie utleniania amoniaku (NH_3) do tlenku azotu(II) w reaktorach do utleniania amoniaku, jest jednym z najbardziej szkodliwych gazów cieplarnianych. Ważnym wyzwaniem dla osób zajmujących się technologią produkcji kwasu azotowego jest ograniczenie emisji N_2O do atmosfery.

Kosz katalityczny stanowi jeden z najważniejszych elementów wewnętrznych reaktora do utleniania amoniaku w instalacji do produkcji kwasu azotowego i ma istotny wpływ na warunki prowadzenia procesu oraz trwałość eksploatacyjną całego układu. Powinien spełniać wysokie wymagania, takie jak: stabilizacja i szczelność warstwy katalizatora do wysokotemperaturowego rozkładu podtlenku azotu (HT-de N_2O), prawidłowe mocowanie pakietu siatek platynowo-rodowych, zapewnienie równomiernego przepływu gazów przez warstwę katalizatora, zabezpieczenie przed bocznikowaniem strumienia gazów z zachowaniem dopuszczalnych oporów przepływu przez warstwę.

Kosz katalityczny w reaktorze do utleniania amoniaku pracuje w warunkach wysokiej temperatury oraz w środowisku gazów nitrozowych. W trakcie kilkuletnich kampanii produkcyjnych, podczas kolejnych uruchomień i zatrzymań instalacji, elementy kosza ulegają odkształceniom oraz następuje zużycie materiału. Zjawiska te sprzyjają powstawaniu nieszczelności, migracji warstwy katalizatora oraz bocznikowaniu mieszaniny reakcyjnej, co z kolei pogarsza parametry pracy układu.

Celem pracy jest określenie kryteriów projektowych i technologicznych, jakie musi spełniać optymalna konstrukcja kosza katalitycznego. Przeanalizowano dotychczasowe rozwiązania konstrukcyjne koszy katalitycznych pracujących w reaktorach utleniania amoniaku w instalacjach kwasu azotowego. Na tej podstawie przedstawiono kryteria projektowe, jakie musi spełniać konstrukcja kosza, aby zapewniała integralność mechaniczną elementów oraz odporność na gwałtowne zmiany temperatury.

Efektem pracy jest koncepcja modernizacji kosza katalitycznego opracowana przez Łukasiewicz – Instytut Nowych Syntez Chemicznych, spełniająca wysokie wymagania eksploatacyjne. Zmodernizowana konstrukcja kosza umożliwi zwiększenie wysokości warstwy katalizatora HT-de N_2O do maksymalnej dostępnej przestrzeni w istniejącym reaktorze, w granicach dopuszczalnych oporów przepływu przez warstwę. Wyniki uzyskane w trakcie wielu kampanii produkcyjnych w instalacjach przemysłowych wskazują, że efektem łącznym większej wysokości warstwy, jej trwałej stabilizacji oraz doszczelnienia strefy przyściennej jest zapewnienie emisji N_2O znacznie poniżej poziomu gwarantowanego dla danej instalacji. Jednocześnie rosnące wymagania producentów kwasu azotowego, którzy skutecznie wydłużają kampanie produkcyjne, powodują, że w większości instalacji kosz katalityczny oraz katalizator muszą obecnie zachować stabilność mechaniczną i aktywność podczas każdej kampanii przez okres 6-7 lat. Sprostanie tym standardom możliwe jest dzięki skuteczności całego zintegrowanego układu kosz-warstwa katalityczna, co potwierdziły wyniki eksploatacji przemysłowej zmodernizowanych koszy katalitycznych w trzynastu reaktorach utleniania amoniaku.

Morfologicznie korygowane równanie Erguna do szacowania spadku ciśnienia w reaktorze utleniania amoniaku z katalizatorem HT-deN₂O

Jakub Rajewski, Marcin Wilk

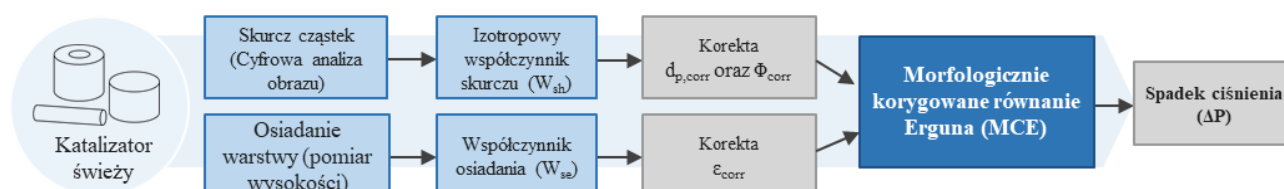
Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Nowych Syntezy Chemicznych, Al. Tysiąclecia Państwa Polskiego 13a, 24-110 Puławy. Autor korespondujący: jakub.rajewski@ins.lukasiewicz.gov.pl

Wysokotemperaturowy katalityczny rozkład podtlenku azotu (HT-deN₂O) jest jedną z najczęściej stosowanych metod ograniczania emisji N₂O w istniejących instalacjach produkcji kwasu azotowego. Katalizator umieszczany jest bezpośrednio pod pakietem siatek katalitycznych Pt-Rh w reaktorze utleniania amoniaku, przez co pracuje w temperaturze > 750 °C [1]. Długotrwała eksploatacja w tych warunkach prowadzi jednak do zmian morfologicznych katalizatora związanych ze spiekaniem materiału, skurczem cząstek oraz osiadaniem warstwy [2]. Zjawiska te wpływają na porowatość złoża i powodują wzrost spadku ciśnienia, którego klasyczne modele hydrodynamiczne nie uwzględniają [2,3].

Celem pracy było określenie wpływu zmian morfologii katalizatora HT-deN₂O na hydraulikę warstwy oraz opracowanie modelu umożliwiającego uwzględnienie tych efektów w obliczeniach projektowych. Badania przeprowadzono dla trzech geometrii katalizatorów (tabletek, pierścieni i wytłoczek), eksploatowanych w warunkach pilotowych i przemysłowych. Określono stopień skurczu cząstek oraz zmiany wysokości warstwy wynikające z jej osiadania.

Stwierdzono, że dla badanych próbek izotropowy skurcz cząstek wynosił od 1,5 do 13,8%, natomiast osiadanie warstwy osiągało wartości do 9%. W oparciu o uzyskane wyniki opracowano morfologicznie korygowane rozszerzenie klasycznego równania Erguna (MCE - Morphology Corrected Ergun) [4], uwzględniające dwa parametry opisujące eksploatację złoża katalitycznego: współczynnik skurczu cząstek (W_{sh}) oraz współczynnik osiadania warstwy (W_{se}). Korekta pozwala na dynamiczne wyznaczanie parametrów strukturalnych warstwy, w szczególności porowatości (ϵ_{corr}), zastępczej średnicy cząstek ($d_{p,corr}$) oraz sferyczności (Φ_{corr}). Model zweryfikowano na podstawie 33 punktów pomiarowych obejmujących trzy geometrie katalizatorów oraz szeroki zakres warunków procesowych. Zastosowanie korekty morfologicznej zmniejszyło średni bezwzględny błąd procentowy prognozy spadku ciśnienia (MAPE) z 26,5% dla klasycznego równania Erguna do 8,1% dla modelu MCE. Największą poprawę uzyskano dla katalizatorów o rozwiniętej geometrii i wysokiej porowatości początkowej, dla których wpływ zmian strukturalnych jest szczególnie istotny.

Uzyskane wyniki wskazują, że uwzględnienie zmian morfologii warstwy jest niezbędne do wiarygodnego prognozowania hydrauliki katalizatorów HT-deN₂O oraz może stanowić użyteczne narzędzie wspomagające projektowanie i ocenę pracy przemysłowych reaktorów utleniania amoniaku.



Rys. 1. Koncepcja modelu MCE – morfologiczne korekty parametrów złoża wprowadzane do równania Erguna.

Bibliografia

- [1] A. Mlinar, A. Pintar, J. Levec, Appl. Catal. A Gen. 204 (2000) 237–252.
- [2] R.M. German, John Wiley & Sons, New York (1996).
- [3] B. Eisfeld, K. Schnitzlein, Chem. Eng. Sci. 56 (2001) 4321–4329.
- [4] K. Ravindran, G. Madhu, J. Innov. Technol. Explor. Eng. 9 (2020) 1103–1109.



S02 KS22

Integracja zewnętrznego strumienia wodoru z ciągiem technologicznym konwencjonalnej wytwórni amoniaku jako krok w kierunku dekarbonizacji przemysłu chemicznego

Ewa Soszyńska-Sumorek¹, Cezary Możejński¹, Martyna Niżnik¹, Agnieszka Dobrzyńska-Inger¹

¹*Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Nowych Syntezy Chemicznych;
Al. Tysiąclecia Państwa Polskiego 13A, 24-110 Puławy;
Ewa.Soszynska-Sumorek@ins.lukasiewicz.gov.pl*

Ograniczenie zużycia gazu ziemnego oraz emisji dwutlenku węgla jest jednym z priorytetowych zadań przemysłu chemicznego. Składnikiem niezbędnym do syntezy amoniaku jest wodór, którego wytwarzanie obecnie opiera się przede wszystkim na reformingu parowym gazu ziemnego. Zmniejszenie zużycia „szarego” wodoru pochodzenia kopalnego może być osiągnięte nie tylko poprzez wdrażanie nowych technologii niskoemisyjnych, lecz także przez efektywne wykorzystanie wodoru dostępnego już w przemysłowych strumieniach gazowych.

Celem pracy jest przedstawienie autorskich rozwiązań technologicznych opracowanych przez Sieć Badawcza Łukasiewicz-Instytut Nowych Syntezy Chemicznych umożliwiających odzysk oraz ponowne wykorzystanie wodoru w istniejących instalacjach przemysłowych. Przeanalizowano dwa przypadki integracji źródeł wodoru z układami przygotowania gazu syntezowego. Zakres prac obejmował opracowanie wariantowych schematów technologicznych, bilansów materiałowo-energetycznych oraz ocenę możliwości wdrożenia proponowanych rozwiązań w warunkach przemysłowych.

Pierwszy przykład dotyczy zagospodarowania wodoru powstającego jako produkt uboczny w procesie odwodornienia propanu do propylenu w instalacji PDH. Opracowano studium wykonalności, a następnie projekt procesowy obejmujący wprowadzenie strumienia wodoru z sekcji PDH do układu przygotowania gazu syntezowego w wytwórni amoniaku. Rozwiązanie pozwala na częściowe zastąpienie wodoru wytwarzanego w układzie przygotowania gazu syntezowego wodorem pochodzącym z innego procesu przemysłowego co prowadzi do ograniczenia zużycia surowców kopalnych. Drugi przykład obejmuje opracowanie rozwiązania technologicznego odzysku wodoru z wysokociśnieniowych gazów wydmuchowych tzw. purge-gazów, instalacji syntezy amoniaku, z zastosowaniem instalacji membranowej (HRU). Zaproponowano rozwiązanie obejmujące utworzenie wspólnego układu skojarzonego dla dwóch zakładów produkcji amoniaku, integrujące wszystkie strumienie procesowe wchodzące i wychodzące z instalacji HRU. Rozwiązanie umożliwia ograniczenie zużycia gazu ziemnego poprzez odzysk i ponowne wykorzystanie wodoru zawartego w gazach wydmuchowych obiegu syntezy amoniaku, zwiększając tym samym stopień wykorzystania wodoru już wytworzonego w procesie reformingu parowego.

Przedstawione przykłady wskazują, że przemysłowe strumienie zawierające wodór mogą stanowić wartościowe źródło tego surowca dla istniejących wytwórni amoniaku. Dobór sposobu ich zagospodarowania wymaga każdorazowo szczegółowej analizy możliwości integracji technologicznej wraz z oceną wpływu proponowanych modyfikacji na parametry eksploatacyjne oraz bezpieczeństwo procesowe instalacji. Odpowiednio zaprojektowane włączenie do układu technologicznego alternatywnych źródeł wodoru może stanowić efektywny etap modernizacji istniejących wytwórni amoniaku, umożliwiając ograniczenie zużycia gazu ziemnego i emisyjności procesu bez konieczności budowy nowych ciągów produkcyjnych. Rozwiązania tego typu mogą stanowić etap przejściowy pomiędzy obecnym modelem produkcji amoniaku opartym na reformingu parowym gazu ziemnego, a przyszłymi technologiami wykorzystującymi wodór niskoemisyjny i odnawialny. Ich wdrażanie umożliwia jednocześnie zdobywanie doświadczeń projektowych i eksploatacyjnych niezbędnych do transformacji technologicznej przemysłu chemicznego.



S02 KS23

Badania nad zastosowaniem pochodnych z grupy ketoimin w roli ekstrahentów jonów miedzi(II) z roztworów wodnych

Katarzyna Witt-Kalicińska¹, Piotr Szczepański²

¹ Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz, e-mail: katarzyna.witt@pbs.edu.pl

² Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń, e-mail: piotrs@chem.umk.pl

W roli ekstrahentów jonów miedzi(II) z roztworów wodnych zastosowano szereg β -ketoimin. Związki te otrzymano z 3-podstawionych pochodnych β -diketonów oraz 3-aminopropylotrietoksylanu.

Początkowo przeprowadzono badania właściwości kompleksujących β -ketoimin oraz wyznaczono stałe trwałości tworzonych przez nie kompleksów z jonami miedzi(II). Ponadto, do oceny właściwości β -ketoimin zastosowano metody chemometryczne, takie jak hierarchiczna analiza skupień oraz analiza głównych składowych.

Interpretacja różnych deskryptorów molekularnych wykazała, że kluczowym czynnikiem decydującym o najlepszych właściwościach ekstrakcyjnych jest obecność dwóch niewielkich podstawników w pozycji 3 cząsteczki. Wyniki klasycznej ekstrakcji ciecz-ciecz potwierdziły, że badane β -ketoiminy – a w szczególności 4-(3-trietoksylilopropylloimino)-3,3-dimetylopentan-2-on – mogą być wykorzystywane jako skuteczne ekstrahenty do usuwania jonów miedzi(II) z roztworów wodnych.

Dwa oblicza kompleksów silanotiolanowych: od analizy strukturalnej do aktywności katalitycznej i emisji światła

Bartosz Cieśla^a, Łukasz Ponikiewski^a, Zbigniew Hnatejko^b, Marzena Białek^c, Piotr Bruździak^d,
Agnieszka Pladzyk^a,

^aKatedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12,
80-233 Gdańsk. e-mail: agnieszka.pladzyk@pg.edu.pl

^bZakład Ziem Rzadkich, Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, ul. Uniwersytetu
Poznańskiego 8, 61-614 Poznań

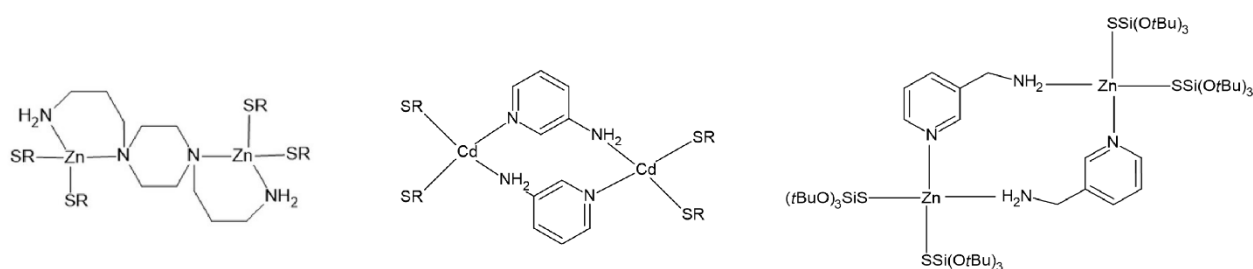
^cKatedra Technologii Chemicznej i Chemii Polimerów, Wydział Chemii, Uniwersytet Opolski, ul. Oleska 48,
45-052 Opole

80-233 Gdańsk. e-mail: bartosz.ciesla@pg.edu.pl

^dKatedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12,
80-233 Gdańsk

Ligandy silanotiolanowe, w tym tri-*tert*-butoksylsilanotiol (TBST), stanowią nietypową klasę ligandów S-donorowych. W przeciwieństwie do wielu tioli organicznych, TBST wykazuje wysoką trwałość w warunkach atmosferycznych. Cecha ta nie tylko ułatwia procedury syntetyczne z jego zastosowaniem, ale również pozwala na wyodrębnienie układów molekularnych i supramolekularnych trwałych w tych warunkach i wykazujących interesujące właściwości fizykochemiczne [1-3]. Wyniki badań eksperymentalnych i teoretycznych wskazują, że wprowadzenie do sfery koordynacyjnej Zn(II) i Cd(II) dodatkowych ligandów o charakterze N-donorowym pozwala na otrzymanie silanotiolanowych układów o analogicznych motywach strukturalnych, lecz o zróżnicowanych profilach właściwości.

W ramach wystąpienia zaprezentowane zostaną najnowsze wyniki obejmujące syntezę, analizę strukturalną oraz właściwości katalityczne i emisyjne wybranych kompleksów silanotiolanowych cynku(II) i kadmu(II).



Rys. 1 Schematy budowy cząsteczkowej wybranych tri-*tert*-butoksylsilanotiolanów cynku(II) i kadmu(II) (R = SSi(OtBu)₃).

[1] A. Pladzyk, D. Kowalkowska-Zedler, A. Ciborska, A. Schnepf, A. Dołęga. Complexes of Silanethiolate Ligands: Synthesis, Structure, Properties, and Application. *Coordination Chemistry Reviews* 437 (2021) 213761.

[2] D. Kowalkowska-Zedler, J. Drzeżdżon, A. Dołęga, R. Łyszczek, P. Bruździak, Z. Hnatejko, B. Cieśla, D. Jaciewicz, A. Pladzyk, Piperazine-Derived Heteroleptic Cd(II) Silanethiolates: Structural Insights, Catalytic Activity in Allyl Alcohol Oligomerization, and CO₂ Sorption Properties. *Applied Organometallic Chemistry* 39 (2025) e70336.

[3] B. Cieśla, Ł. Ponikiewski, P. Bruździak, Z. Hnatejko, R. Łyszczek, A. Pladzyk, The Impact of Pyrazine Derivatives on the Structure and Luminescence of Zn(II)/Cd(II) Tri-*tert*-butoxysilanethiolate Complexes. A Combined Spectroscopic and Computational Study, *Polyhedron* 283 (2026) 117852.



Sesja posterowa

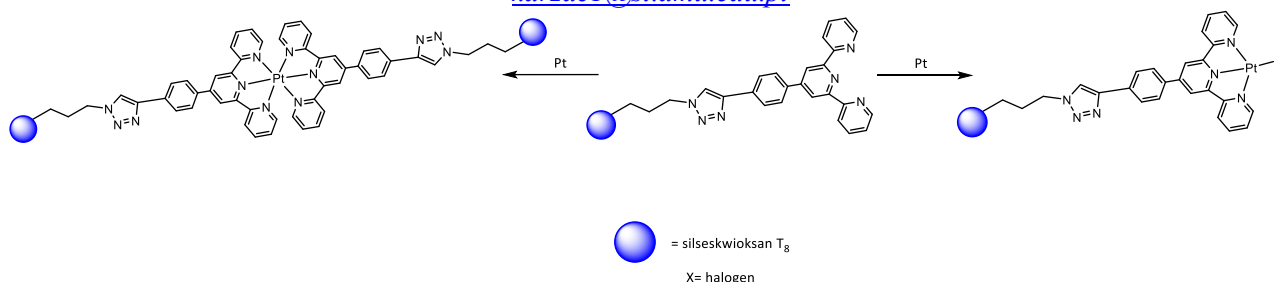
Właściwości fotofizyczne klatkowych związków krzemu jako kotwic dla tridentnych ligandów typu *N,N,N* do koordynacji wybranych metali bloku d

Karolina Zaćlona,¹ Julia Zdunek,¹ Monika Rzonsowska,¹ Beata Dudziec^{1,2}, Aleksandra Kaniewska¹

¹Wydział Chemii, Uniwersytet im. A. Mickiewicza w Poznaniu, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, Poznań

²Centrum Zaawansowanych Technologii, Uniwersytet im. A. Mickiewicza w Poznaniu, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 10, Poznań

karzac1@st.amu.edu.pl



Silseskwioxsany (POSS) to grupa klatkowych związków krzemu zaliczanych do materiałów hybrydowych ze względu na nieorganiczny szkielet zbudowany z atomów krzemu i tlenu połączonych wiązaniami mostkowymi i przyłączone do niego grupy organiczne R. Szkielet zapewnia zwiększoną odporność termiczną, mechaniczną czy chemiczną a grupy organiczne R pozwalają na modyfikację struktury w celu uzyskania pożądanych właściwości [1]. Te unikatowe cechy sprawiają, że silseskwioxsany są szeroko stosowane min. w inżynierii materiałowej, medycynie, katalizie, czy energetyce [2,3].

Terpirydyna (Tpy) jako tridentny ligand typu *N,N,N* wykazuje silne powinowactwo do wiązania z kationami metali, pozwalając na stabilizację metali o niskiej wartościowości w tym m.in. Ni, Fe czy Pt. Co ciekawe, pierścienie pirydynowe przed koordynacją do kationu metalu wykazują geometrię *trans-trans* minimalizując odpychania między elektronami wolnych par azotów, natomiast po koordynacji Tpy przyjmuje geometrię *cis-cis*, ulegając zjawisku przekształcenia strukturalnego [4]. Tpy została zakotwiczona na klatce silseskwioxsanu za pomocą reakcji 1,3-dipolarnej cykloaddycji Huisgena katalizowanej jonami Cu(I) (CuAAC). Proces jest regioselektywny do produktu 1,4-podstawionego i polega na addycji azydowo-alkinowej prowadzącej do powstania ugrupowania 1,2,3-triazolowego [5]. Otrzymany ligand skoordynowano do metalu Pt(II), w stosunku 1:1 oraz 1:2 metal:ligand, a także zbadano wpływ jonów metali na własności fotofizyczne otrzymanych związków.

Podziękowanie: NCN – OPUS21 UMO-2021/41/B/ST5/02028, IDUB projekt 212/64/UAM/0013

Literatura:

- [1] John, Ł.; Ejfler, J. *Polymers* **2023**, 15 (6), 1452.
- [2] Kannan, A., Muthuraj, C., Mayavan, A., Gandhi, S. *Materials Today Chemistry* **2023**, 30, 101568.
- [3] Duszczak, J., Mituła, K., Santiago-Portillo, A., Soumoy, L., Rzonsowska, M., Januszewski, R., Fusaro, L., Aprile, C., Dudziec, B. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2021**, 13, 22806–22818
- [4] Kainat, S. F.; Hawsawi, M. B.; Mughal, E. U.; Naeem, N.; Almohyawi, A. M.; Altass, H. M.; Hussein, E. M.; Sadiq, A.; Moussa, Z.; Abd-El-Aziz, A. S.; Ahmed, S. A.; *RSC Adv.* **2024**, 14, 21464–21537.
- [5] Fantoni, N. Z.; El-Sagheer, A. H.; Brown, T. A *Chem Rev* **2021**, 121 (12), 7122–7154



S02 P02

Selektywna synteza związków krzemooorganicznych za pomocą kompleksów żelaza z ligandami pincerowymi

Wiktorias Zasiieczna, Hanna Stachowiak-Dłuzynska, Grzegorz Hreczycho

Zakład Chemii i Technologii Związków Krzemu, Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

*ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań
wikzas@st.amu.edu.pl*

Opracowywanie wydajnych i selektywnych metod tworzenia wiązań Si–C stanowi jeden z istotnych kierunków rozwoju współczesnej chemii krzemooorganicznej. Szczególne znaczenie mają reakcje hydrosililowania oraz dehydrogenującego sprzęgania alkinów z wodorosilanami, umożliwiające otrzymanie odpowiednio winylosilanów i alkynylosilanów.^[7] Procesy te są często katalizowane przez kompleksy metali szlachetnych charakteryzujące się wysoką aktywnością. Jednak wysoki koszt tych metali oraz ich ograniczona dostępność skłaniają do poszukiwania alternatywnych układów opartych na pierwiastkach powszechnie występujących w skorupie ziemskiej. W tym kontekście szczególnie obiecujące jest żelazo, które dzięki dużej dostępności, niskiej cenie oraz stosunkowo niewielkiej toksyczności stanowi atrakcyjną alternatywę w projektowaniu bardziej zrównoważonych systemów katalitycznych.^[8,9]

Reakcje nienasyconych węglowodorów z wodorosilanami katalizowane kompleksami metali pierwszego szeregu przejściowego mogą jednak przebiegać według konkurencyjnych ścieżek, tj. hydrosililowania i dehydrogenującego sililowania. W rezultacie prowadzą one do powstania mieszaniny regioizomerów, stereoizomerów oraz związków o zróżnicowanym stopniu nasycenia. Z tego względu opracowanie układów katalitycznych odznaczających się nie tylko wysoką aktywnością, lecz także selektywnością stanowi istotne wyzwanie. Kluczową rolę w tym zakresie odgrywają ligandy pincerowe, których sztywna, trójdonorowa architektura zapewnia silną koordynację centrum metalu, a modyfikacja ich budowy umożliwia dostrojenie właściwości elektronowych i sterycznych kompleksu, wpływając na aktywność katalityczną oraz kierunek i selektywność przemiany. Z tego względu kompleksy żelaza z ligandami pincerowymi stanowią perspektywiczną grupę katalizatorów do opracowania wydajnych, ekonomicznych i przyjaznych środowisku metod syntezy funkcjonalizowanych związków krzemooorganicznych.^[10]

Celem badań jest preparatyka nowych kompleksów żelaza zawierających aminofosfinowe ligandy pincerowe oraz ocena ich aktywności katalitycznej w reakcjach alkinów z wodorosilanami jako alternatywy dla katalizatorów opartych na metalach szlachetnych. Opracowanie wysoce selektywnej i efektywnej metody umożliwi otrzymanie szeregu interesujących produktów krzemooorganicznych o szerokim spektrum aplikacyjnym.

*Badania sfinansowane w ramach programu „Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza”
Study@Research”, nr 212/64/UAM/0061*

*Autorzy dziękują również Narodowemu Centrum Nauki za wsparcie finansowe w ramach projektu SONATINA
UMO-2024/52/C/ST4/00058.*

⁷ Marciniak, B., Ed. *Hydrosilylation: A Comprehensive Review on Recent Advances*; Advances in Silicon Science, Vol. 1; Springer: Dordrecht, 2009. DOI: 10.1007/978-1-4020-8172-9.

⁸ Stachowiak, H.; Kuciński, K.; Kallmeier, F.; Kempe, R.; Hreczycho, G. Cobalt-Catalyzed Dehydrogenative C–H Silylation of Alkynylsilanes. *Chem. Eur. J.* **2022**, 28, e202103629. DOI: 10.1002/chem.202103629.

⁹ Du, X.; Huang, Z. Advances in Base-Metal-Catalyzed Alkene Hydrosilylation. *ACS Catal.* **2017**, 7, 1227–1243. <https://doi.org/10.1021/acscatal.6b02990>.

¹⁰ Bauer, G.; Hu, X. Recent Developments of Iron Pincer Complexes for Catalytic Applications. *Inorg. Chem. Front.* **2016**, 3, 741–765. <https://doi.org/10.1039/C5QI00262A>.



S02 P03

Direct Fluorination of Mixed Ag and Pt Precursors: Towards New Ag(II)-Containing Fluoride Phases

Alina Climova, Przemysław Malinowski, Wojciech Grochala

Center of New Technologies, University of Warsaw, Stefana Banacha 2C, 02-097, Warsaw Poland
e-mail: a.climova@cent.uw.edu.pl

Silver(II) fluorides belong to a distinct class of compounds characterized by the d^9 electronic configuration of the Ag(II) ion, a strongly covalent nature of the metal–fluorine bond, and remarkable magnetic and electronic properties. Due to these features, Ag(II)-based materials are often considered to be electronic analogs of oxocuprate systems and they attract interest as model systems for studying the behavior of strongly correlated electrons and low-dimensional magnetism[1]. Despite significant progress in the field of AgF_2 chemistry and related materials, the discovery of new fluorides containing Ag(II) remains a major synthetic challenge due to the immense reactivity of the Ag(II) cations and the high oxidizing power of these compounds[2].

Among the ternary fluoride systems containing Ag(II), the group of Ag–Pt–F compounds occupies a special position. The brown compound $\text{Ag(II)[Pt(IV)F}_6]$ was first synthesized and structurally characterized by Graudejus et al., which demonstrated that the second electron affinity of platinum hexafluoride is large enough to stabilize $\text{Ag(II)[Pt(IV)F}_6]$ rather than $\text{Ag(I)[Pt(V)F}_6]$ [3]. Another known compound is $(\text{Ag(II)F})_2[\text{Ag(III)F}_4][\text{PtF}_6]$, a black mixed-valence salt obtained as the primary product of the reaction between O_2PtF_6 and AgFBF_4 , with AgPtF_6 forming as a readily detectable byproduct[4]. These two examples exhaust the list of the known Ag–Pt–F compounds.

In this work, the synthesis of the Ag–Pt–F system was attempted *via* a low-temperature solid-gas route, using fluorine-free silver and platinum precursors. Several precursor mixtures with varying Ag:Pt molar ratios, including 9:1, 8:2, 7:3, 6:4 and 5:5, were prepared and subsequently fluorinated with several bars of gaseous 100% F_2 at room temperature. This approach is expected to promote extensive ligand exchange, accompanied by the elimination of O-, H-, Cl- and N-containing species as volatile reaction products, thereby creating highly reactive conditions favorable for the formation of fluorinated Ag(II)-containing phases. Preliminary phase analysis indicates the formation of multiphase polycrystalline products. AgF_2 is consistently observed as one of the major crystalline phases, while additional platinum-containing phases are also detected. The attempts to elucidate the identity, composition, and crystal structures of these Pt-containing products using x-ray diffraction and spectroscopic techniques will be reported in this contribution. Particular attention is devoted to the possible formation of novel mixed Ag–Pt fluoride phases.

[1] W. Grochala, *J. Supercond. Nov. Magn.*, 2018, **31**, 737–752.

[2] Z. Mazej, D. Kurzydłowski and W. Grochala, in *Photonic and Electronic Properties of Fluoride Materials*, Elsevier, 2016, pp. 231–260..

[3] O. Graudejus, S. H. Elder, G. M. Lucier, C. Shen and N. Bartlett, *Inorg. Chem.*, 1999, **38**, 2503–2509.

[4] C. Shen, B. Žemva, G. M. Lucier, O. Graudejus, J. A. Allman and N. Bartlett, *Inorg. Chem.*, 1999, **38**, 4570–4577.



S02 P04

Chemia koordynacyjna w nanoreaktorach: kompleksy wanadu(IV), nośniki i mikrofałe w wodnej polimeryzacji MMA

J. Drzeżdżon^{1,2*}, P. Parcheta-Szwindowska³, M. A. Baluk¹, O. Chernyayeva⁴, Y. Liu², N. Pinna²

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

² Wydział Chemii i Centrum Nauki o Materiałach w Berlinie, Uniwersytet Humboldtów w Berlinie, Berlin,
Zum Großen Windkanal 2, 12489 Berlin

³ Katedra Technologii Polimerów, Wydział Chemii, Politechnika Gdańska,
ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk

⁴ Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk
ul. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa

*joanna.drzezdzon@ug.edu.pl

Klasyczna chemia koordynacyjna napotyka poważne bariery w środowisku wodnym, gdzie zachodzi szybka, hydrolityczna dezaktywacja labilnych centrów metalicznych [1-3]. Zastąpienie toksycznych rozpuszczalników organicznych wodą w zrównoważonej syntezie polimerów wymaga zatem nowatorskiego podejścia do stabilizacji układów katalitycznych, opierającego się na zastosowaniu nanoreaktorów. Zjawisko nanouwięzienia modyfikuje profil termodynamiczny i kinetyczny układu, pozwalając na aktywację kompleksów pierwotnie wysoce wrażliwych na hydrolizę [4, 5].

W niniejszej prezenacji pokazujemy, że kompleksy wanadu(IV) wykazują wysoką aktywność katalityczną dzięki precyzyjnej inżynierii przestrzennej. Zamknięcie tych związków wewnątrz nanorurek TiO_2 generuje lokalne, hydrofobowe mikrośrodowisko. Zastosowanie takiego nośnika skutecznie osłania centrum metaliczne przed atakami nukleofilowymi cząsteczek wody, jednocześnie wpływając na dyfuzję i lokalne stężenie hydrofobowego monomeru wewnątrz porów. Poprzez systematyczne modyfikowanie ligandów, zidentyfikowaliśmy współdziałanie między osłoną przestrzenną (ang. steric shielding) a efektem nanouwięzienia. Zjawisko to powoduje przyspieszenie procesu polimeryzacji, pozwalając na osiągnięcie konwersji monomeru na poziomie przekraczającym 90% w zaledwie 15 minut, co eliminuje konieczność prowadzenia wielogodzinnych procesów termicznych. Nasza strategia jednoznacznie dowodzi, że wysoce labilne kompleksy koordynacyjne mogą z powodzeniem działać jako stabilne katalizatory w środowisku wodnym, torując drogę do zrównoważonej syntezy zaawansowanych materiałów polimerowych.

Literatura

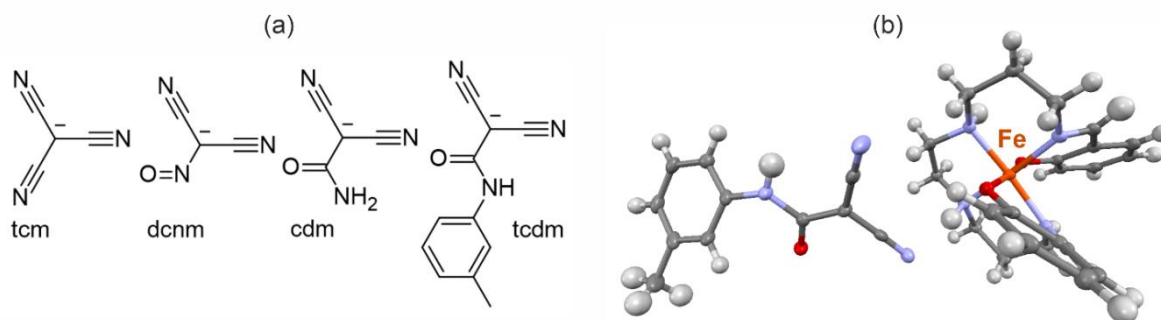
- [1] Redshaw, C. Coordination Chemistry of the Calix[6]Arene System: Application in Polymerisation Catalysis and Beyond. *Dalton Transactions* 2025, 54 (18). <https://doi.org/10.1039/d5dt00473j>.
- [2] Nomura, K.; Zhang, S. Design of Vanadium Complex Catalysts for Precise Olefin Polymerization. *Chemical Reviews*. 2011. <https://doi.org/10.1021/cr100207h.b>
- [3] Wang, Y., Lai, J., Gou, Q., Gao, R., Zheng, G., Li, B., ... & Guo, Z. (2026). Synthesis of well-defined polyolefin graft copolymers based on single-site transition metal-mediated olefin polymerization. *Chinese Chemical Letters*, 112424. <https://doi.org/10.1016/j.cclet.2026.112424>
- [4] Drzeżdżon, J., Parcheta-Szwindowska, P., Baluk, M. A., Chernyayeva, O., Liu, Y., & Pinna, N. (2026). Microwave-assisted aqueous MMA polymerization over TiO_2 nanotubes decorated with vanadium complexes. *Catalysis Science & Technology*. <https://doi.org/10.1039/d6cy00367b>
- [5] Drzeżdżon, J., Baluk, M. A., Parcheta-Szwindowska, P., Chernyayeva, O., Liu, Y., & Pinna, N. (2026). Molecular shielding in TiO_2 nanotubes: unlocking oxovanadium (IV) for ultrafast aqueous polymerization. *Chemical Communications*. <https://doi.org/10.1039/d6cc02152b>

Funkcjonalizowane aniony dicyjanometanianowe w konstrukcji materiałów molekularnych łączących efekty magnetyczne i nieliniową optykę

Paweł Porębski, Michał Liberka, Barbara Sieklucka, Szymon Chorąży

Zakład Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński;
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, Polska;
pawel.porebski@student.uj.edu.pl

Jednym z wiodących trendów w badaniach materiałów molekularnych opartych na kompleksach metali jest poszukiwanie związków łączących kilka różnych właściwości fizycznych, w tym magnetycznych, optycznych i elektrycznych.^[1,2] Takie unikalne materiały są badane ze względu na ich wykorzystanie do konstrukcji nowej generacji urządzeń przechowywania i przetwarzania danych oraz do konstrukcji czujników czynników fizycznych i chemicznych.^[3,4] W tym kontekście celem naszej pracy było projektowanie, synteza i charakterystyka materiałów opartych na kationowych kompleksach metali przejściowych wykazujących zjawisko przejścia spinowego (*spin crossover*, SCO), w tym kompleksach Fe(II), Fe(III), czy Mn(III), które można funkcjonalizować za pomocą anionowych kompleksów innego metalu lub anionów organicznych.^[5,6] W wyniku połączenia takich bloków budulcowych możliwe jest indukowanie wielofunkcyjnego charakteru związku, który łączy efekt SCO z innymi właściwościami fizycznymi, takich jak nieliniowe efekty optyczne, w tym generacja drugiej harmonicznej (SHG), luminescencja, czy ferroelektryczność. Realizując taki cel, uwagę skupiono na kationowych kompleksach SCO Fe(III) z odpowiednio modyfikowanymi zasadami Schiffa oraz grupie anionów dicyjanometanianowych, które można różnorodnie funkcjonalizować (Rys. 1). Bazując na kompleksie SCO Fe(III) oraz serii pochodnych dicyjanometanianu, otrzymano rodzinę materiałów molekularnych łączących efekt SCO i silny efekt SHG wynikający z łamania symetrii krystalicznej. Ponadto w zakresie temperatur helowych obserwuje się procesy powolnej relaksacji magnetycznej związanej z izolacją magnetyczną kompleksów Fe(III) w sieci krystalicznej poprzez rozbudowane aniony organiczne.



Rys. 1 Wzory strukturalne anionów zawierających grupę dicyjanometanianową (a) oraz struktura krystaliczna jednego z otrzymanych materiałów łączących anion tcdm z kompleksem Fe(III) (b).

[1] Y. Zhang, W.-Q. Liao, D.-W. Fu, H.-Y. Ye, C.-M. Liu, Z.-N. Chen, R.-G. Xiong, *Adv. Mater.*, **2015**, 27, 3942. [2] J. Wang, J. J. Zakrzewski, M. Heczko, M. Zychowicz, K. Nakagawa, K. Nakabayashi, B. Sieklucka, S. Chorazy, S. Ohkoshi, *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, 142, 3970. [3] T. Charytanowicz, J. Wang, H. Tokoro, K. Tran, F. Renz, S. Ohkoshi, S. Chorazy, B. Sieklucka, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2024**, 64, e202419242. [4] A. Hoffman, M. Zychowicz, J. Wang, K. Matsuura, F. Kagawa, J. Rzepiela, M. Heczko, S. Baś, H. Tokoro, S. Ohkoshi, S. Chorazy, *Chem. Sci.*, **2025**, 16, 8979. [5] V. Jornet-Molla, Y. Duan, C. Gimenez-Saiz, Y.-Y. Tang, P.-F. Li, F. M. Romero, R.-G. Xiong, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, 56, 14052. [6] R. Diaz-Torres, G. Chastanet, E. Collet, E. Trzop, P. Harding, D. J. Harding, *Chem. Sci.*, **2023**, 14, 7185.

Influence of Metal Centers, Ligand Alkyl Substitution, and Hydration on Triazole-Based Metal Complexes

P. Le Garff¹, R. Jalmakhanbetova², R. M. Losus¹, W. Dehaen², L. Dobrzańska¹

¹Nicolaus Copernicus University in Toruń, Faculty of Chemistry, 87-100 Toruń, Poland, ²KU Leuven, Department of Chemistry, 3001 Leuven, Belgium
paul-legarff@doktorant.umk.pl

Triazole-based ligands are versatile building blocks [1,2] for the synthesis of coordination compounds and provide an excellent platform for systematically investigating the effects of a range of factors on the formation and structural properties of metal complexes. [3,4]

Herein, we present an isostructural series of Ni(II), Co(II), and Cu(II) complexes based on the methyl-substituted ligand **L1** (2-(1-methyl-1H-1,2,3-triazol-4-yl)-1H-benzo[d]imidazole) with nitrate counterions. To evaluate the influence of alkyl substitution, the methyl group was replaced with an ethyl group to afford ligand **L2** (2-(1-ethyl-1H-1,2,3-triazol-4-yl)-1H-benzo[d]imidazole). The Cu(II) complex of **L2** was obtained as a hydrated phase and structurally characterized. Although the hydrated Cu(II) complexes of **L1** and **L2** exhibit essentially the same molecular structure and closely related crystal packing, they differ in the arrangement of nitrate counterions and lattice water molecules. Upon heating, both hydrated complexes undergo single-crystal to single-crystal (SC–SC) dehydration while preserving single crystallinity. Comparison of the resulting anhydrous phases reveals substantially more pronounced differences in crystal packing, particularly along one crystallographic direction, highlighting the sensitivity of the dehydration pathway to subtle variations in ligand substitution and crystal packing. These findings highlight the important role of ligand design and crystal solvation in controlling the solid-state behaviour of coordination compounds.

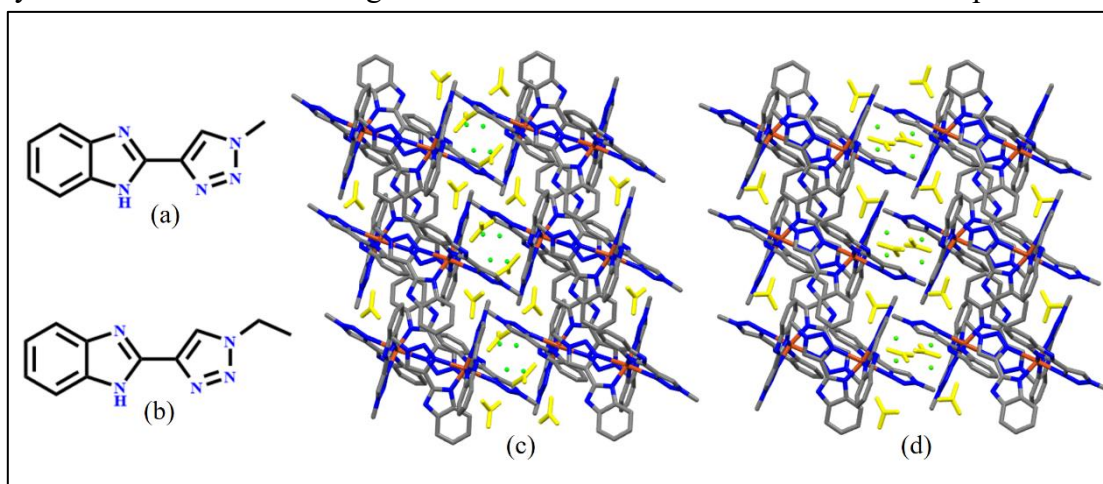


Figure 1 (a) **L1**: 2-(1-methyl-1H-1,2,3-triazol-4-yl)-1H-benzo[d]imidazole; (b) **L2**: 2-(1-ethyl-1H-1,2,3-triazol-4-yl)-1H-benzo[d]imidazole; (c) packing diagram of hydrated Cu(II) complex containing **L1** viewed along the *b* axis; (d) packing diagram of the hydrated Cu(II) complex containing **L2** viewed along the *b* axis.

- [1] G. Aromí, L. A. Barrios, O. Roubeau, P. Gamez, *Coordination Chemistry Reviews*, 2011, 255, 485–546
- [2] M.C. Joseph, A.J. Swarts, S.F. Mapolie, *Coordination Chemistry Reviews*, 2023, 493, 215317
- [3] J.-L. Du., T.-L. Hu, X.-H. Bu, *Solid State Sciences*, 2012, 14, 419–425
- [4] D.R. Husbands Ç. Özsan, A. Welsh, R. J. Gammons, A. Frei, *Nature Communications*, 2025, 16, 11195

Ocena i porównanie aktywności przeciwbiofilmowej kompleksów rutenu na różnych stopniach utlenienia wobec szczepu *Pseudomonas aeruginosa* PAO1

Patrycja Rogala¹, Agnieszka Jabłońska-Wawrzycka¹, Grzegorz Czerwonka², Maciej Hodorowicz³, Sławomir Michałkiewicz¹

¹ Instytut Chemii, Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, ul. Uniwersytecka 7, 25-406 Kielce, patrycja.rogala@ujk.edu.pl

² Instytut Biologii, Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, ul. Uniwersytecka 7, 25-406 Kielce,

³ Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

Globalny wzrost antybiotykooporności bakterii stanowi obecnie jedno z najpoważniejszych wyzwań dla współczesnej chemii medycznej. Zjawisko to jest bezpośrednią konsekwencją powszechnego nadużywania chemioterapeutyków oraz niezwyklej zdolności adaptacyjnych drobnoustrojów, które poprzez mutacje genetyczne i zmiany fenotypowe stają się niewrażliwe na działanie dotychczas stosowanych leków [1]. Szczególnym utrudnieniem w leczeniu infekcji jest zdolność bakterii do tworzenia biofilmów. Komórki bytujące w tej zorganizowanej strukturze wykazują odmienną fizjologię i nawet 1000-krotnie wyższą oporność na substancje przeciwdrobnoustrojowe w porównaniu do ich form planktonowych. Wynika to m.in. z obecności zewnątrzkomórkowej macierzy polimerowej (EPS), stanowiącej barierę dyfuzyjną dla leków, oraz występowania komórek o obniżonym metabolizmie. W obliczu tak zaawansowanych mechanizmów obronnych patogenów kluczowa staje się intensyfikacja badań nad nowymi klasami cząsteczek leczniczych.

Obiecującą alternatywą dla tradycyjnych leków organicznych są kompleksy jonów metali [2]. Dzięki obecności jonu centralnego na różnych stopniach utlenienia oraz zdolności do tworzenia specyficznych interakcji z biomolekułami, połączenie metalu z odpowiednio dobranymi ligandami pozwala na uzyskanie efektu synergistycznego. W niniejszej pracy podjęto próbę oceny skuteczności przeciwdrobnoustrojowej kompleksów rutenu na różnych stopniach utlenienia (Ru(II), Ru(III) i Ru(IV)) z ligandami N,N- i N,O-donorowymi. Jako model badawczy wykorzystano biofilm formowany przez szczep *Pseudomonas aeruginosa* PAO1 – oportunistyczny patogen, u którego mechanizmy oporności biofilmowej stanowią poważny problem terapeutyczny. Wpływ badanych kompleksów na biomasę biofilmu określono ilościowo przy użyciu testu kolorymetrycznego z fioletem krystalicznym (CV).

Zgodnie z wynikami przeprowadzonych analiz, badane kompleksy rutenu wykazały zdolność do znaczącego hamowania tworzenia biofilmu *P. aeruginosa* PAO1, a ich aktywność przewyższała działanie wolnych ligandów. Najbardziej efektywne okazały się kompleksy rutenu z 2-(2'-pirydylo)benzimidazolem, które w stężeniu 1 mM zredukowały biomasę biofilmu o 75-83% [3]. Zaobserwowany efekt hamujący był porównywalny do działania leków referencyjnych: streptomycyny i cyprofloksacyny. Otrzymane wyniki wskazują, że syntezowane kompleksy rutenu to wysoce obiecująca grupa związków, która może posłużyć jako podstawa do opracowania nowych środków przeciwbiofilmowych.

Podziękowanie: Badania finansowane ze środków Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego – projekt badawczy SUPB.RN.25.220.

1. F. Prestinaci, P. Pezzotti, A. Pantosti, Pathog. Glob. Health., 2015,109, 309–318.

2. M. Claudel, J. V. Schwarte, K.M. Fromm, Chemistry, 2020, 2, 849–899.

3. A. Jabłońska-Wawrzycka, P. Rogala, G. Czerwonka, K. Gałczyńska, M. Drabik, M. Dańczuk, Int. J. Mol. Sci., 2021, 22, 10113.

Imidazo[1,5]karchloryna jako wielofunkcyjny ligand w chemii metali przejściowych

Kinga Szydełko^a, Sebastian Koniarz^a, Piotr J. Chmielewski^a

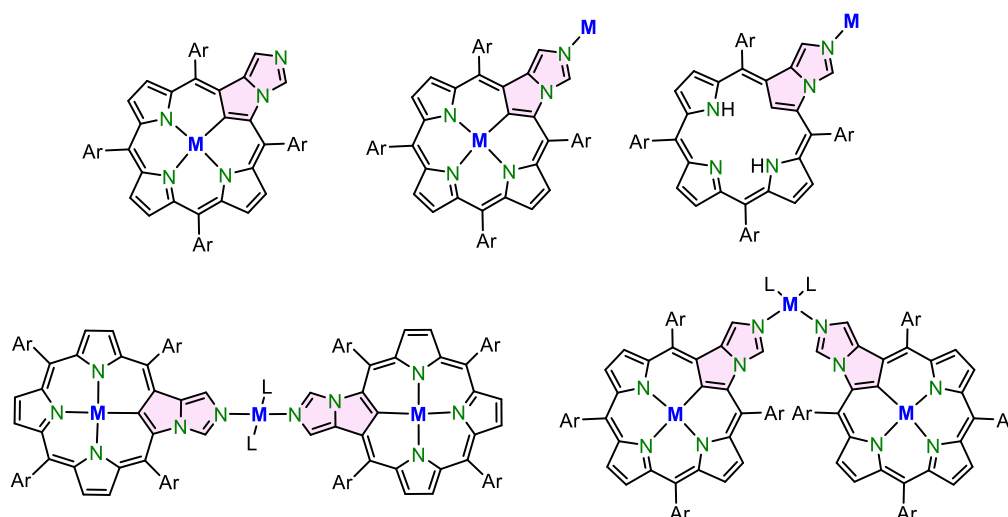
^aUniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

*e-mail: kinga.szydelko@uwro.edu.pl

Imidazo[1,5]karchloryna (ICC), otrzymywana w reakcji N-odwróconej porfiryryny z tosylometyloizocyjanianem (TOSMIC), stanowi interesujący porfiryrynowid zawierający dodatkowy pierścień imidazolowy skondensowany z makrocyklem. Obecność łatwo dostępnego atomu azotu w pierścieniu imidazolowym, obok makrocyklicznego układu donorowego NNNC, umożliwia wykorzystanie alternatywnych miejsc koordynacji i nadaje cząsteczce wyjątkowe właściwości koordynacyjne [1-3].

W wyniku przeprowadzonych reakcji otrzymano serię kompleksów ukazujących różnorodność właściwości koordynacyjnych imidazo[1,5]karchloryny. W zależności od charakteru centrum koordynacyjnego oraz warunków prowadzenia reakcji ligand może wykorzystywać odmienne miejsca donorowe, prowadząc do powstania związków o zróżnicowanej architekturze koordynacyjnej [4].

Otrzymane związki podkreślają potencjał imidazo[1,5]karchloryny jako wszechstronnego liganda do projektowania nowych układów koordynacyjnych.



Rysunek 1. Przykładowe sposoby koordynacji jonów metali przez imidazo[1,5]karchlorynę (ICC).

Literatura:

- [1] D. Ren, S. Koniarz, X. Li, P. J. Chmielewski; *Chem. Commun.*, **2020**, 56, 4836.
- [2] A. M. van Leusen, J. Wildeman, O. H. Oldenziel; *J. Org. Chem.*, **1977**, 42, 1153.
- [3] J. F. Longevial, S. Clement, J. A. Wytko, R. Ruppert, J. Weiss, S. Richeter; *Chem. Eur. J.* **2018**, 24, 15442.
- [4] K. Szydełko, S. Koniarz, M. J. Białek, P. J. Chmielewski; *Dalton Transactions* **2025**, 1-15.

Weryfikacja wpływu modyfikacji zeolitu ZSM-5 roztworem NaOH oraz zastosowanie otrzymanego katalizatora Cu-ZSM-5 w procesie NH₃-SCR-DeNO_x

Magdalena Jabłońska

*Instytut Technologii Chemicznej, Uniwersytet w Lipsku, Linnéstraße 3, 04103 Lipsk, Niemcy;
 Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, ul. Tamka 12, 91-403
 Łódź;
 magdalena.jablonska@chemia.uni.lodz.pl*

Selektywna katalityczna redukcja tlenków azotu amoniakiem (NH₃-SCR-DeNO_x) jest najczęściej stosowaną technologią ograniczania emisji NO_x zarówno w źródłach mobilnych, jak i stacjonarnych. Liczne badania wykazały, że katalizatory o strukturze mikro-/mezoporowatej charakteryzują się znacznie wyższą aktywnością oraz większą selektywnością względem N₂ niż konwencjonalne katalizatory oparte na zeolitach stosowane w procesie NH₃-SCR-DeNO_x.

Serię komercyjnie dostępnych zeolitów ZSM-5 o różnych stosunkach molowych $n(\text{Si})/n(\text{Al})$ (11,5; 15; 25; 40 i 140) poddano obróbce roztworem NaOH w celu otrzymania materiałów o mikro-/mezoporowatej strukturze. Charakterystyka fizykochemiczna otrzymanych zeolitów potwierdziła większą zawartość form miedzi w próbkach poddanych modyfikacji NaOH, co przypisano zwiększonej dostępności centrów aktywnych w zmodyfikowanych zeolitach ZSM-5. Ograniczenia dyfuzyjne zweryfikowano metodą pulsowego gradientu pola (PFG-NMR), wykorzystując heksan jako cząsteczkę sondującą. Badania te wykazały poprawę transportu masy dla materiałów o stosunku molowym $n(\text{Si})/n(\text{Al})$ większym niż 11,5. Aktywność katalityczną oceniono w reakcji selektywnej redukcji katalitycznej tlenków azotu amoniakiem. Dla materiałów otrzymanych z zeolitów ZSM-5 poddanych obróbce NaOH zaobserwowano wyższą aktywność katalityczną w temperaturach poniżej 250 °C. Badania z wykorzystaniem techniki modulacyjnej wykazały ponadto, że obróbka NaOH zwiększa reaktywność kwasowych centrów Brønsteda (BAS), przyczyniając się do wzrostu aktywności katalitycznej w procesie NH₃-SCR-DeNO_x.

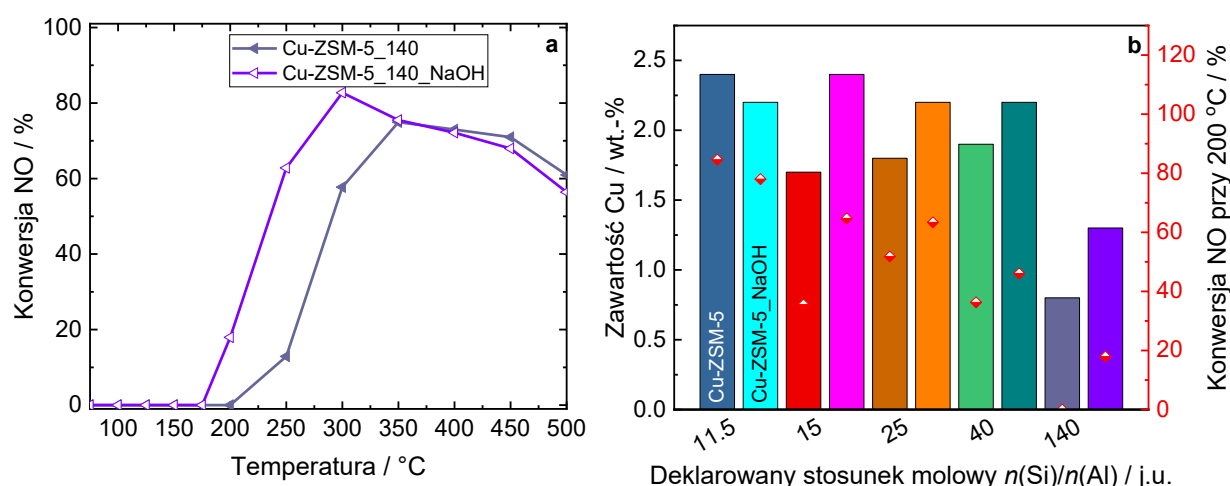


Fig. 1: a) Konwersja NO na katalizatorach Cu-ZSM-5_140 i Cu-ZSM-5_140_NaOH, b) korelacja między zawartością Cu a stopniem konwersji NO przy 200 °C. Warunki reakcji: $m_K = 0,1$ g; GHSV = 30,000 h⁻¹; $c(\text{NO}) = 0,1$ vol.-%; $c(\text{NH}_3) = 0,1$ vol.-%; $c(\text{O}_2) = 10$ vol.-%; w atmosferze helu; $F_{\text{TOT}} = 120$ ml min⁻¹.

MAGNESIUM BORATES FOR THE IMMOBILIZATION OF RADIOACTIVE WASTE

Karolina Matuszak, Rafał Petrus, Piotr Sobota

¹Wrocław University of Science and Technology, Faculty of Chemistry, 23 Smoluchowskiego, 50-370 Wrocław

karolina.matuszak@pwr.edu.pl

The reprocessing of spent nuclear fuel produces high-level radioactive waste (HLW), consisting primarily of fission products (e.g., ^{135,137}Cs(I), ⁸⁷Rb(I), ⁹⁰Sr(II), ⁹³Zr(IV), ⁹⁹Tc(IV), ¹²⁹I, and lanthanides), transuranic elements such as ²³⁹Pu(IV) and minor actinides (e.g., ²³⁷Np(IV), ^{241,243}Am(III), and ^{243,244,245}Cm(III)), all of which exhibit long-lived radioactivity. Immobilizing these radioactive ions in highly durable and stable solid matrices is a key strategy for preventing the migration of nuclear waste and subsequent environmental contamination. In materials chemistry, the study of radioactive materials presents significant challenges. Therefore, non-radioactive lanthanide elements are often used as surrogates for minor actinides because of their similar chemical properties, outer-electron configurations, oxidation states, and ionic radii. Common examples include La(III), Nd(III), and Eu(III), which are employed as surrogates for Ac(III), Cm(III), and Am(III), respectively.

In this study, $[\text{Mg}_4(\mu_3\text{-OR})_4(\text{HOEt})_4\text{Cl}_4]$ and H_3BO_3 were used as molecular precursors for the preparation of magnesium borate nanomaterials for radioactive ion immobilization. These materials were prepared with Mg:B:Ln molar ratios of 1:2:0.3 and 1:2:0.5 and sintered at temperatures ranging from 200 to 1100 °C. The homometallic and heterometallic lanthanide alkoxides $[\text{Ln}_4\text{Mg}(\mu_6\text{-O})(\mu_3\text{-OR})_8(\text{X})_x\text{Cl}_6]$, (where Ln = Nd (X = HOR; x = 2), Sm (x = 0) or Eu (X = H₂O; x = 0.25)), and $[\text{Ln}_4(\mu_4\text{-O})(\mu\text{-OR})_4(\mu\text{-OMe})_2(\text{HOMe})_4\text{Cl}_4]$ (where Ln = Ho, Er) were used as surrogate models for minor actinides to investigate potential pathways for the immobilization of high-level nuclear waste, as shown in Figure 1.

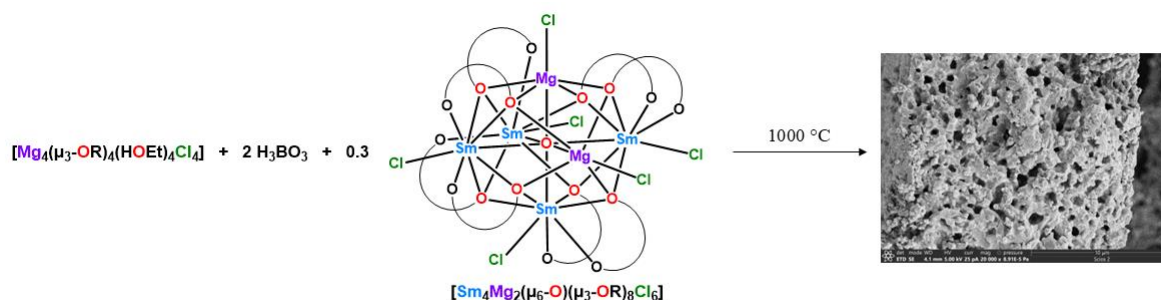


Fig. 1. Synthesis of a magnesium borate matrix with immobilized Sm(III) ions.

Acknowledgments: The authors want to thank National Science Centre for financial support under grant no. 2023/49/B/ST4/04068.

References

- [1] Yang, X.; Fang, D.; Chen, L.; Liu, Y.; Wang, S.; Xu, L.; Zhang, A.; Su, J.; Xu, C.; Xiao, C. JACS Au 2024, 4, 4744-4756.
- [2] Fabian, M.; Pinakidou, F.; Tolnai, I.; Czompoly, O.; Osan, J. Sci. Rep. 2021, 11, 13272.
- [3] Petrus, R.; Kowaliński, A.; Lis, T.; Siczek, M.; Sobota, P. Inorg. Chem. 2025, 64, 16020-16035.



S02 P11

Reaktywność jonów miedzi(II) wobec fenoli o podwyższonym potencjale redoks

Alan Kreft, Anna Dołęga

*Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska;
ul. Gabriela Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk;
s206769@student.pg.edu.pl*

Rozwój nowoczesnych układów neuromorficznych oraz pamięci nieulotnej (memrystorów) wymaga nieustannego projektowania nowych, zaawansowanych materiałów koordynacyjnych. Związki wykazujące zdolność do kontrolowanej zmiany stanów utlenienia stanowią w tym kontekście wysoce obiecującą grupę struktur do budowy warstw aktywnych, zdolnych do modulacji przewodnictwa elektrycznego. Celem prezentowanych badań była synteza nowych kompleksów miedzi(II) z wykorzystaniem ligandów redoks-aktywnych, w tym izomerów cyjanofenolu oraz imin.

Bezpośrednia reakcja jonów miedzi(II) z fenolami o dużej zawadzie sterycznej i wysokiej aktywności redoks stwarza jednak istotne wyzwania syntetyczne. Generuje ona silną termodynamiczną konkurencję między pożądanym procesem koordynacji a ubocznymi reakcjami utleniania-redukcji, skutkującymi najczęściej degradacją struktury liganda oraz redukcją centrum metalicznego. Aby zablokować te niepożądane ścieżki i skutecznie ustabilizować jony miedzi(II), w ramach zaprezentowanych badań zaprojektowano i zoptymalizowano dwie alternatywne strategie syntetyczne.

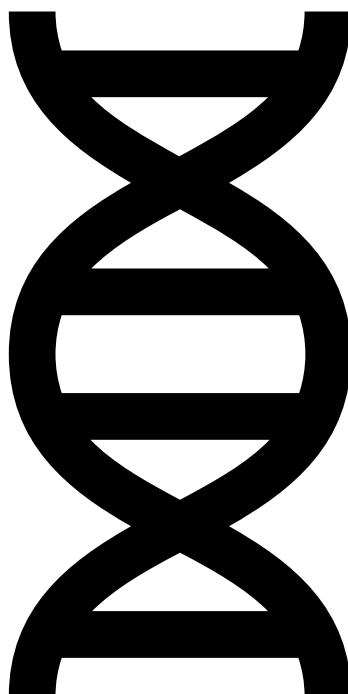
Pierwsza z nich opierała się na wykorzystaniu trójkleszczowej zasady Schiffa o właściwościach O,N,O-donorowych, otrzymanej w wyniku kondensacji *o*-waniliny z 2-aminofenolem (2-[(2-hydroksyfenyl)imino]metylo}-3-metoksyfenolu). Analiza widm w podczerwieni (FT-IR) dla wyizolowanych ciał stałych wykazała całkowity zanik szerokiego pasma pochodzącego od drgań rozciągających grup fenolowych oraz ostre przesunięcia pasm wiązania iminowego C=N. Stanowi to jednoznaczny dowód na powstanie trwałego kompleksu ze zdeprotonowanym ligandem. Druga strategia obejmowała aktywację 2-, 3- oraz 4-cyjanofenoli poprzez ich deprotonację w środowisku zasadowym, z jednoczesnym wykorzystaniem dodatków koordynujących. Analiza spektroskopowa dla tej serii potwierdziła występowanie rezonansu fenolanowego, uwidocznionego poprzez przesunięcie pasma drgań grupy -CN w stronę niższych liczb falowych, a także obecność koordynujących jonów azotanowych. Szczególnie wysoką efektywność stabilizacji zaobserwowano dla układu z 2-cyjanofenolem, gdzie wprowadzenie pirydyny do środowiska reakcji pozwoliło na wyparcie cząsteczek rozpuszczalnika ze sfery koordynacyjnej i najprawdopodobniej wyizolowanie czystego kompleksu mieszanoligandowego.

Zastosowanie zmodyfikowanych ścieżek syntetycznych pozwoliło na ominięcie barier termodynamicznych związanych z uboczną reaktywnością redoks. Otrzymano i scharakteryzowano serię nowych, stabilnych kompleksów miedzi(II), które stanowią perspektywiczną bazę materiałową do dalszych badań aplikacyjnych. Obejmują one w szczególności osadzanie cienkich warstw z roztworów oraz analizę charakterystyk prądowo-napięciowych pod kątem ich implementacji w nowoczesnych urządzeniach memrystywnych.



S03

Chemia biologiczna i medyczna





Wykłady sekcyjne

Wieloplatformowa charakterystyka fenotypu metabolicznego w modelu zespołu progerii Hutchinsona-Gilforda

Michał Ciborowski^{1,2}, Patrycja Mojsak¹, Joanna Godzien¹, Julia Zelkowska¹, Karolina Pietrowska¹, Adrian Godlewski¹, Adam Kretowski^{1,3}, Elena Martín^{4,5}, Miguel de la Fuente^{4,5}, María González-Amor^{4,5}, Beatriz Dorado^{4,5}, Vicente Andres^{4,5}

¹Laboratorium Metabolomiki i Proteomiki, Centrum Badań Klinicznych, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku (UMB), Białystok; ²Zakład Biochemii Lekarskiej, UMB, Białystok; ³Klinika Endokrynologii, Diabetologii i Chorób Wewnętrznych, UMB, Białystok; ⁴Centro Nacional de Investigaciones Cardiovasculares (CNIC), Madryt, Hiszpania; ⁵CIBER de Enfermedades Cardiovasculares (CIBECV), Madryt, Hiszpania; michal.ciborowski@umb.edu.pl

Zespół progerii Hutchinsona-Gilforda (HGPS) jest ultrarazadką chorobą genetyczną prowadzącą do przedwczesnego starzenia, spowodowaną ekspresją progeryny – zmutowanej formy laminy A. Ze względu na wielonarządowy charakter choroby, jej fenotyp metaboliczny pozostaje niewystarczająco poznany. Celem badania była kompleksowa charakterystyka zmian metabolicznych związanych z HGPS z wykorzystaniem komplementarnych platform metabolomicznych.

Próbki osocza oraz jednojądrzastych komórek krwi obwodowej (PBMC) pobrano od sześciu myszy z HGPS oraz sześciu myszy typu dzikiego (wild type). Analizy przeprowadzono z wykorzystaniem celowanej metabolomiki opartej na zestawie Biocrates, obejmującym około 500 metabolitów, oraz niecelowanych metod GC-MS i LC-MS. Do oceny zróżnicowania profili metabolicznych zastosowano analizy jedno- i wielowymiarowe, w tym PCA oraz modele oparte na PLS i OPLS.

Celowana analiza metabolomiczna wykazała wyraźną separację pomiędzy zwierzętami z HGPS a grupą kontrolną zarówno w osoczu ($R^2 = 0,993$, $Q^2 = 0,967$), jak i w PBMC ($R^2 = 0,999$, $Q^2 = 0,958$). Łącznie 224 metabolity w osoczu oraz 112 w PBMC różniły się między grupami. Najliczniejsze zmiany dotyczyły triacylogliceroli, fosfatydylocholin, lizofosfatydylocholin i estrów cholesterolu, co wskazuje na wyraźne zaburzenia metabolizmu lipidów. Niezależna analiza GC-MS również wykazała silne zróżnicowanie profili HGPS i kontroli ($R^2 = 0,984$, $Q^2 = 0,978$). Po korekcji na wielokrotne porównania 20 metabolitów pozostawało istotnych statystycznie, obejmując m.in. aminokwasy, kwasy organiczne oraz związki związane z metabolizmem węglowodanów. Wstępna analiza danych LC-MS potwierdziła obecność wyraźnych różnic pomiędzy grupami na poziomie cech metabolicznych.

Dodatkowo, niezależnie od zastosowanej platformy analitycznej, obserwowano wyraźne zróżnicowanie profili metabolicznych związane z płcią, widoczne zarówno w analizach PCA, jak i w modelach nadzorowanych. Część zmian związanych z HGPS była wspólna dla obu płci, podczas gdy inne obserwowano wyłącznie u samców lub samic.

Uzyskane wyniki wskazują, że HGPS wiąże się z rozległymi zmianami metabolicznymi, obejmującymi przede wszystkim gospodarkę lipidową, a także metabolizm aminokwasów, węglowodanów oraz procesy związane z przemianami energetycznymi. Spójność obserwacji uzyskanych z wykorzystaniem różnych platform analitycznych zastosowanych w badaniu wzmacnia wiarygodność zidentyfikowanych zmian metabolicznych, jednocześnie podkreślając złożoność fenotypu metabolicznego HGPS oraz wskazując na potrzebę uwzględniania płci jako istotnej zmiennej biologicznej w dalszych badaniach.

Podziękowanie: Projekt jest finansowany przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w ramach 4. konkursu European Joint Programme on Rare Diseases (EJP RD) ze środków budżetu państwa. Program EJP RD otrzymał finansowanie z programu ramowego Unii Europejskiej Horyzont 2020. Nr umowy: EJPRD/IV/78/ProgerOmics/2023.



S03 WS02

Od fotonów do funkcji: Dynamiczne mapowanie metabolizmu wewnątrzkomórkowego

Małgorzata Barańska,

Anna Pieczara, Wiktoria Korona, Barbara Orzechowska, Krzysztof Brzozowski

*Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński
ul. Gronostajowa 2, Kraków*

e-mai: m.baranska@uj.edu.pl

Celem badań jest pokonanie ograniczeń czułości i specyficzności w subkomórkowym obrazowaniu spektroskopowym. W pracy demonstrujemy potencjał nowo syntetyzowanych, wysoce czułych molekularnych sond bioortogonalnych, zaprojektowanych do selektywnego i precyzyjnego znakowania organelli w żywych komórkach, i obrazowania spektroskopowego. Opracowano sondy do znakowania i śledzenia funkcji mitochondriów, kropli lipidowych, jądra i retikulum endoplazmatycznego.

Unikalne profile spektroskopowe tych znaczników w tzw. cichym zakresie widma oscylacyjnego pozwalają eliminować tło komórkowe. Specyficzność tych sond i pomiar na platformie multimodalnej TRAM (Tandem Raman Microscopy) umożliwia monitorowanie zmian biochemicznych związanych m.in. z funkcjami mitochondrialnymi in vitro w czasie rzeczywistym.

Dzięki integracji technik nieliniowych SRS i CARS (Stimulated Raman Scattering, Coherent Antistokes Raman Scattering) oraz systemu O-PTIR (Optical Photothermal Infrared spectroscopy) wspieranych przez zaawansowaną fuzję danych opartą na sztucznej inteligencji (AI), podejście to pozwala na śledzenie metabolizmu i interakcji lek-komórka z rozdzielczością przekraczającą limit dyfrakcyjny tradycyjnej podczerwieni. Prezentowana strategia stanowi solidne, zautomatyzowane narzędzie do głębokiej analizy subkomórkowej, gdzie sondy otwierają drzwi do zrozumienia dynamiki życia na poziomie molekularnym.

Podziękowania

Praca została wykonana przy finansowaniu Narodowego Centrum Nauki, (NCN), Maestro 2022/46/A/ST4/00054 Małgorzata Barańska.



S03 WS03

Nowoczesna chemia analityczna szansą na małoinwazyjną diagnostykę hipertermii złośliwej

Barbara Bojko¹, Joanna Bogusiewicz¹, Katarzyna Burlikowska¹, Karol Jaroch¹, Natalia Treder^{2,3}, Helena Kim^{4,5}, Harald Schoeny⁴, Fiametta di Marco⁴, Belén Fernández-Requena⁶, Carolina Gonzalez-Riano⁶, Şeyma Kır⁷, Ó. A. Marqués⁸, Díaz-Cambronero^{8,9}, Sibel A. Ozkan¹⁰, Coral Barbas⁶, Ezel Boyaci⁷, Gunda Koellensperger⁴, Janusz Pawliszyn³

Afiliacja:

¹Katedra Farmakodynamiki i Farmakologii Molekularnej, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Polska; ²Katedra i Zakład Chemii Farmaceutycznej, Polska; ³Department of Chemistry, University of Waterloo, Kanada; ⁴Department of Analytical Chemistry, University of Vienna, Austria; ⁵Vienna Doctoral School in Chemistry, University of Vienna, Austria; ⁶Centre for Metabolomics and Bioanalysis (CEMBIO), Universidad San Pablo CEU, Hiszpania; ⁷Department of Chemistry, Middle East Technical University, Turkey; ⁸Perioperative Medicine Research Group, Instituto de Investigación Sanitaria La Fe, Valencia, Spain; ⁹Anesthesiology and Critical Care, Hospital la Fe, Valencia, Spain; ¹⁰Department of Analytical Chemistry, Ankara University, Turkey;

adres korespondencyjny;
e-mail: bbojko@cm.umk.pl

Hipertermia złośliwa (MH, ang. malignant hyperthermia) jest stanem farmakogenetycznym wywołanym dziedzicznym defektem homeostazy wapniowej w komórkach mięśni szkieletowych, predysponującym do potencjalnie śmiertelnej reakcji na niektóre środki znieczulające. U pacjentów z podejrzeniem MH, u których nie wykryto znanego markera genetycznego, podatność na MH można wykluczyć jedynie poprzez fenotypowanie fizjologiczne za pomocą inwazyjnych testów skurczu mięśni. Testy te są wykonywane jedynie w kilku specjalistycznych ośrodkach na świecie i wymagają chirurgicznej biopsji mięśnia. Wynikający z tego ból, koszty podróży, niezdolność do funkcjonowania w okresie rekonwalescencji oraz możliwość powikłań chirurgicznych powstrzymują większość osób z grupy ryzyka przed poddaniem się profilaktycznym badaniom.

Celem projektu jest opracowanie małoinwazyjnego urządzenia opartego na biopsji chemicznej, tj. biokompatybilnej mikroekstrakcji do fazy stałej (bioSPME, ang. solid phase microextraction) in vivo, połączonego ze stacjonarnym instrumentem detekcyjnym, jako nowej strategii analitycznej do identyfikacji i walidacji sygnatur cząsteczkowych do diagnozowania podatności na MH in vivo.

Wieloośrodkowe badania poprzedzające etap badań klinicznych obejmują zarówno analizy niecelowane jak i celowane na modelach zwierzęcych (szczurzy nie-MH i wieprzowy MH) oraz biopsjach mięśni ludzkich. Niecelowane analizy metabolomiczne i lipidomiczne pozwoliły na wyodrębnienie związków o potencjale biomarkerów diagnostycznych, dla których opracowywane są protokoły ilościowe z wykorzystaniem biopsji chemicznej. W niniejszej prezentacji przedstawione zostaną kolejne etapy prac nad protokołem SPME oraz porównanie metody z protokołem opartym na mikropoborze próbki z następującą kilkietapową ekstrakcją typu ciecz-ciało stałe (SLE, ang. solid-liquid extraction) w ośrodku referencyjnym.

Badanie zostało sfinansowane ze środków the European Joint Programme Rare Diseases, The Joint Transnational Call 2022 (JTC2022), w ramach projektu badawczego „SPMH: Metabolic test in vivo for malignant hyperthermia” (EJPRD/IV/30/SPMH/2024)



S03 WS04

Systemy *Organ-on-Chip* w badaniach przedklinicznych: nowe możliwości modelowania chorób i oceny terapii

Zbigniew Brzózka¹, Bartłomiej Łuszczuk¹, Zofia Jaźwiec¹, Gabriela Ułanowicz¹, Paweł Romańczuk¹, Oliwia Lewińska¹, Aleksandra Szlachetka¹, Natalia Lewenko^{1,2}, Patrycja Baranowska², Agnieszka Żuchowska¹, Elżbieta Jastrzębska^{1,2}

¹ Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska

² Centrum Zaawansowanych Materiałów i Technologii, Politechnika Warszawska;
zbignew.brzoakza@pw.edu.pl

Odkrywanie i rozwój nowych leków pozostają procesami niezwykle czasochłonnymi i kosztownymi, a skuteczność translacji wyników badań przedklinicznych do badań klinicznych jest nadal bardzo niska. Szacuje się, że spośród około 250 kandydatów na leki, które pomyślnie przechodzą etap badań przedklinicznych i trafiają do badań klinicznych, jedynie jeden zostaje ostatecznie wprowadzony na rynek farmaceutyczny.

Jedną z głównych przyczyn tego problemu jest ograniczona zdolność obecnie stosowanych modeli badawczych do wiernego odwzorowania warunków fizjologicznych organizmu człowieka. Standardowe modele *in vitro* nie odzwierciedlają złożoności mikrośrodowiska tkankowego, natomiast modele zwierzęce często nie reprodukuja ludzkiej patofizjologii oraz odpowiedzi na terapię. Odpowiedzią na te wyzwania są mikrofluidyczne systemy *Organ-on-a-Chip* (OoC), umożliwiające tworzenie zaawansowanych modeli tkankowych i narządowych odwzorowujących kluczowe cechy mikrośrodowiska *in vivo*. Technologia OoC stwarza nowe możliwości w zakresie modelowania chorób, badań mechanizmów biologicznych oraz testowania skuteczności i toksyczności leków.

W trakcie prezentacji przedstawione zostaną możliwości wykorzystania systemów *Organ-on-a-Chip* w badaniach przedklinicznych jako alternatywy dla klasycznych hodowli komórkowych oraz badań na zwierzętach. Omówione zostaną wybrane przykłady zaawansowanych modeli OoC, w tym *Tumor-on-Chip* do badań onkologicznych i testowania terapii przeciwnowotworowych, *Brain-on-Chip* do modelowania stanów depresyjnych i oceny działania leków antydepresyjnych oraz *Liver-on-Chip* do badań nad zwłóknieniem i nowotworami wątroby. Przedstawione zostaną również strategie *Multi-Organ-on-Chip* umożliwiające analizę interakcji między narządami w kontekście chorób nowotworowych oraz oceny skuteczności terapii. Prezentacja będzie także wskazywać kierunki dalszego rozwoju technologii OoC oraz ich potencjał translacyjny w nowoczesnej medycynie i farmacji.



S03 WS05

Minimalnie inwazyjne strategie bioanalityczne: od badań molekularnych do medycyny precyzyjnej

Tomasz Bączek

*Katedra i Zakład Chemii Farmaceutycznej, Gdański Uniwersytet Medyczny;
ul. Hallera 107, 80-416 Gdańsk;
e-mail: tbaczek@gumed.edu.pl*

Bioanalityka zmierza w kierunku pozyskiwania informacji molekularnej przy możliwie małej ingerencji w badany układ biologiczny. Wykład przedstawi dwa kierunki badań wykorzystujące nowe strategie pobierania próbek i analizę spektrometrią mas.

Pierwszy obejmuje zastosowanie biokompatybilnej mikroekstrakcji do fazy stałej (SPME) w bezpośrednim pobieraniu i analizie próbek z układów biologicznych. Przedstawione zostaną przykłady oznaczania fitokannabinoidów w żywych roślinach *Cannabis sativa* oraz profilowania endokannabinoidów w wybranych strukturach mózgu i serca. SPME pozwala ograniczyć ilość pobieranego materiału, etapy przygotowania próbki i zużycie rozpuszczalników.

Drugi kierunek dotyczy wykorzystania kondensatu wydychanego powietrza (EBC) jako nieinwazyjnej matrycy do badań molekularnych człowieka. Opracowane metody LC-MS/MS oznaczania aminokwasów oraz system standaryzowanego pobierania EBC stworzyły podstawy do fenotypowania metabolicznego. Podejście to zastosowano m.in. w badaniach białaczki u dzieci, obturacyjnego bezdechu sennego oraz zmian metabolicznych po chirurgii bariatrycznej.

Oba kierunki pokazują, że sposób pobierania materiału biologicznego jest integralną częścią strategii analitycznej. Połączenie minimalnie inwazyjnego próbkowania z wysokoczułą analizą instrumentalną otwiera nowe możliwości badań molekularnych oraz ich zastosowania w diagnostyce i medycynie precyzyjnej.

Piśmiennictwo

1. Woźniczka, K.; Trojan, V.; Urbanowicz, K.; Schreiber, P.; Zadrozna, J.; Bączek, T.; Smoleński, R.T.; Roszkowska, A. *In vivo* profiling of phytocannabinoids in *Cannabis spp.* varieties via SPME-LC-MS analysis, *Analytica Chimica Acta* 2024, 1306, 342621.
2. Bączek, T.; Konieczna, L.; Siebert, J.; Krawczuk, M.; Doliński, Ł.; Redlarski, G. A method for collecting breath samples; EP 4 122 388 B1, 2024.
3. Kaliszewska, A.; Struczyński, P.; Kwiatkowska, S.; Nowak, D.; Bączek, T.; Konieczna, L. A novel approach to the isolation of disease markers: quantitative analysis of amino acids in exhaled breath condensates from sleep apnea patients with enhanced sampling and LC-ESI-MS. *Journal of Separation Science* 2025, 48, e70079.



S03 WS06

Sztuczne sieci neuronowe w racjonalnym projektowaniu leków

Andrzej Bąk

*Uniwersytet Śląski w Katowicach;
Ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice;
Andrzej.Bak@us.edu.pl*

Ze względu na złożoną naturę oddziaływań lek-receptor utworzenie pożądanego profilu farmakologicznego leku stanowi nadal niezwykle trudne wyzwanie metodologiczne. Racjonalne projektowanie leków opiera się w głównej mierze na określeniu równowagi (tzw. 'sweet spot') pomiędzy właściwościami farmakokinetycznymi i farmakodynamicznymi substancji o potencjalnym zastosowaniu leczniczym. Techniki komputerowego wspomaganie projektowania (CAMD) oraz algorytmy sztucznej inteligencji (AI) stosowane są z powodzeniem w wielowymiarowych badaniach określania ilościowych zależności pomiędzy strukturą leku, a jego właściwościami fizykochemicznymi (mD-QSAR). W szczególności, komputery umożliwiły wydajne obliczenia deskryptorów molekularnych oraz tworzenie matematycznych modeli zależności SAR, które mogą być użyteczne do analizy oddziaływań lek-receptor oraz przewidywania (w ograniczonym zakresie) aktywności nowych związków chemicznych.

Opracowane metody komputerowego projektowania leków podzielić można zasadniczo na dwie główne grupy. Pierwsza (RI-QSAR) opiera się na poszukiwaniu analogii w zbiorze podobnych strukturalnie związków z utworzeniem przestrzennej mapy oddziaływań tzw. farmakofora, który uznać można za swoisty odwrotny obraz receptora. W drugiej grupie metod (RD-QSAR) poszukiwany jest niskocząsteczkowy bioefektor jako komplementarne dopełnienie znanej geometrii receptora przy pomocy technik dokowania molekularnego i dynamiki molekularnej (MDs).

Algorytmy sztucznej inteligencji, w szczególności sztuczne sieci neuronowe (ANN), symulują działanie rzeczywistych układów biologicznych, co umożliwia analizę dużej liczby danych. Opracowana metodologia projekcji potencjału elektrostatycznego powierzchni związku chemicznego na dwuwymiarową mapę topograficzną (CoMSA) pozwala na redukcję wymiarowości danych (3D→2D). Zastępczy obraz receptora, reprezentowany przez cząsteczkę o największej aktywności, charakteryzowany może być tzw. wzorcową mapą Kohonena. Tak wytrenowana sieć, zachowując informacje o geometrii cząsteczki wzorca, służy do tworzenia dwuwymiarowych porównawczych map potencjału elektrostatycznego pary cząsteczek. Uzyskane mapy topograficzne, stanowiące pewien rodzaj superpozycji dwóch molekuł, charakteryzują się występowaniem białych obszarów tzw. pustych neuronów. Określają one neurony, które nie otrzymały żadnych sygnałów z powierzchni przeciwwzorca, wskazując jednocześnie topologiczną niezgodność badanych cząsteczek – umożliwia to modelowanie zależności struktura-aktywność biologiczna związku chemicznego.

Ważnym problemem w badaniach QSAR jest wskazanie tzw. konformacji bioaktywnej. W opracowanej metodzie SOM-4D-QSAR wykonuje się symulacje dynamiki molekularnej cząsteczek, a uzyskane w ten sposób dane wykorzystywane są jako wejście sieci neuronowe Kohonena.



S03 WS07

Stomatologiczne cementy glasjonomerowe

Jacek Kłos

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Chemii, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań.

jacek.klos@amu.edu.pl

Po przejściu od gospodarki zbieracko – łowieckiej do rolniczej pojawiły się problemy z zębami z uwagi na takie elementy diety jak czysta mąka oraz cukier. Pierwszy ze współczesnych materiałów stomatologicznych, tj. amalgamat rtęciowy pojawił się dopiero w połowie XIX w. W latach 60tych wprowadzono materiały kompozytowe, a w roku 1976 wymyślono cement glasjonomerowy, który po udoskonaleniach wprowadzono do użytku w roku 1990. W obecnym czasie odchodzi się od materiałów amalgamatowych, mimo wielu ich zalet. W związku z tym stosuje teraz przede wszystkim materiały kompozytowe oraz w mniejszym stopniu materiały glasjonomerowe.

Glasjonomerowe cementy składają z dwóch komponentów, z proszku szkła fluorowo – glinowo – krzemowego (glasjonomeru): CaF_2 35%, SiO_2 31%, Al_2O_3 20%, AlPO_4 10%, NaF 4% oraz AlF_3 3% oraz roztworu polimerowego kwasu organicznego, najczęściej jest to 40% poli(kwas akrylowy). Wiązania cementu polega na reakcji zobojętniania zasada – kwas, pomiędzy szkłem a poli(kwasem akrylowym). W rezultacie tworzą się: nierozpuszczalne sole (poliakrylany wapnia i glinu – matryca) otaczające nieprzereagowany proszek szklany, hydrożel krzemianowy otaczający cząstki rdzeni szklanych, woda związana luźno i silnie. Tak powstały cement posiada szereg zalet, m.in.: adhezja do szkliska, zębiny i metali (najbardziej szczelny ze wszystkich materiałów do wypełnień), uwalnianie fluorku do otaczających tkanek (efekt przeciwpóchnicowy i likwidacja nadwrażliwości szkliska i zębiny), bardzo wysoka biokompatybilność, stabilność wymiarów po związaniu (brak skurczu, dobra odporność na zgniatanie do 220 – 250 MPa), zasadowy odczyn (właściwości bakteriostatyczne i przeciwpóchnicowe po związaniu, w trakcie wiązania jest kwaśny). Mimo powyższego oraz faktu że materiał ten powstał 50 lat temu, nie wszystkie jego właściwości zostały przebadane.

Część z właściwości cementów glasjonomerowych udało się poznać w toku badań na Wydziale Chemii UAM oraz Wydziale Stomatologii UMP, stwierdzono mianowicie, że: (1) cementy glasjonomerowe wchłaniają i gromadzą H_2O , która reaguje i ma wpływ na dojrzewanie cementu. Mechanizm wiązania wody w cemencie ma związek z reakcją: $\text{Si} - \text{O} - \text{Si} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2 \text{Si} - \text{OH}$, (2) woda na powierzchni szkła jest związana w następujący sposób: luźno związana, związana wiązaniami wodorowymi lub w postaci blisko położonych grup $\text{Si} - \text{OH}$, (3) właściwości fizyczne szkła: gęstość 2.6 – 2.9 g/cm^3 , powierzchnia właściwa 1.42 – 2.73 m^2/g , wielkość porów 0.0029 – 0.0083 cm^3/g oraz skład, który jest zgodnym ze znanym składem szkła, (4) cementy glasjonomerowe działają jako bufony w stanie stałym; obecność nieprzereagowanego szkła w cemencie sprawia, że są bardziej skuteczne w buforowaniu kwasów niż zasad oraz (5) wytrzymałość cementów glasjonomerowych nie zależy od własności fizycznych szkła, ale wynika z różnic w ilości wody i stanie powierzchni szkła.

1. B. Czarnecka, J. Kłos, J. W. Nicholson, Ceram.-Silik., 2015, 59, 292
2. J. Kłos, A. Wawrzyńczak, J. W. Nicholson, I. Nowak, B. Czarnecka, Ceram.-Silik., 2020, 64, 1
3. A. Wawrzyńczak, J. Kłos, I. Nowak, B. Czarnecka, Molecules, 2021, 26, 5279-1
4. J. Kłos, J. W. Nicholson, B. Czarnecka, J. mater. res. technol., 2021, 15, 3570
5. J. Kłos, B. Czarnecka, J. W. Nicholson, Ceram.-Silik., 2017, 61, 106



S03 WS08

Wybrane nośniki do sporządzania innowacyjnych formułacji terapeutycznych przydatnych w onkologii

Violetta Kozik, Agata Kawulok, Marlena Paździor, Aleksandra Szymczyk, Andrzej Bąk
Instytut Chemii, WNSiT, Uniwersytet Śląski w Katowicach
Uniwersytet Śląski w Katowicach, Instytut Chemii, ul.Szkolna 9, 40-006, Katowice
violetta.kozik@us.edu.pl

Poszukiwanie nowych leków przeciwnowotworowych jest bardzo istotne w aspekcie rozwijających się metod leczniczych i prognozowanego wzrostu zachorowalności w społeczeństwie. Choroby onkologiczne pomimo poprawy rokowań dla pacjentów i postrzegania ich jako chorób przewlekłych, wymagają zastosowania kompleksowego i innowacyjnego spojrzenia świata naukowego z uwzględnieniem personalizacji terapeutycznej uwzględniającej rodzaj, typ i genetykę zmian. Odkrycie aktywnej struktury potencjalnego leku jest pierwszym i bardzo istotnym krokiem dla nowoczesnych terapii lecz niemniej istotne jest tzw. vehiculum, w postaci właściwego nośnika, który pozwoli na dostarczenie leku do ogniska miejsca zmienionego chorobowo. Idealny nośnik leku w terapii celowanej powinien spełniać kilka warunków, między innymi: być stabilny chemicznie i fizycznie w warunkach *in vitro* oraz *in vivo*, biochemicznie obojętny, biokompatybilny i biodegradowalny, mieć zdolność transportu odpowiedniej dawki terapeutycznej, a także mieć kontrolowaną i przewidywalną szybkość uwalniania. Typ nośnika determinuje jego kształt, rozmiar, ładunek, efektywność kapsułkowania leku, jak również wpływa na jego uwalnianie. Nowoczesne nośniki stwarzają nowe perspektywy dostarczania chemioterapeutyków bezpośrednio do miejsca zmienionego chorobowo. Poszukiwanie innowacyjnych rozwiązań dostarczania leków spowodowało badanie i potencjalne zastosowanie nośników, takich jak: liposomy, komórki mezenchymalne MSC, egzosomy, niosomy, polimery, czy pochodne tlenków grafenu.

Dobrze dobrany i opracowany nośnik niczym „koń trojański” może pozwolić na lepszy transport leku, zmniejszenie toksyczności, wzrost biodostępności i akumulacji w obszarze guzów. Zastosowanie innowacyjnych formułacji leków w leczeniu pacjentów onkologicznych, daje duże nadzieje na poprawę czynników rokowniczych w trakcie i po terapii.



S03 WS09

Opracowanie i charakterystyka materiałów biopolimerowych wzbogaconych związkami fenolowymi

Beata Kaczmarek-Szczepańska^{1,2*}, Dorota Chmielniak¹, Karina Fałkowska¹, Magdalena Ciesielska¹, Ambika H Shinde¹, Magdalena Obieziurska-Fabisiak³, Lidia Zasada¹

¹Laboratorium Funkcjonalnych Materiałów Polimerowych, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

²Instytut Studiów Zaawansowanych, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

³Katedra Chemii Organicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu

*beata.kaczmarek@umk.pl

Biopolimery stanowią grupę naturalnych lub otrzymywanych z udziałem organizmów żywych makrocząsteczek, które ze względu na biodegradowalność oraz wysoką biokompatybilność znajdują zastosowanie w wielu dziedzinach, takich jak medycyna, farmacja, rolnictwo czy przemysł opakowaniowy. Mimo dużego potencjału do wytwarzania biomateriałów, ich praktyczne wykorzystanie często ograniczają niewystarczające właściwości mechaniczne i fizykochemiczne, dlatego konieczne jest stosowanie odpowiednich metod modyfikacji.

Jednym z obiecujących kierunków poprawy właściwości biopolimerów jest wykorzystanie kwasów fenolowych jako naturalnych środków sieciujących. Związki te, dzięki obecności licznych grup hydroksylowych, mogą tworzyć wiązania wodorowe z łańcuchami polimerów, wpływając na ich strukturę oraz stabilność. Ponadto wykazują aktywność przeciwutleniającą i przeciwzapalną, dzięki czemu pełnią funkcję bioaktywnych modyfikatorów, zwiększających zarówno właściwości użytkowe, jak i biofunkcjonalność otrzymanych materiałów. W efekcie modyfikowane biomateriały charakteryzują się lepszymi parametrami mechanicznymi i strukturalnymi oraz zdolnością do wspierania procesów regeneracji tkanek, kontrolowanego uwalniania substancji terapeutycznych i regulowania odpowiedzi immunologicznej organizmu.

Liczne badania naukowe wykazały, że wprowadzenie kwasów fenolowych, takich jak kwas taninowy, ferulowy, kawowy czy galusowy, do matryc polimerowych istotnie poprawia właściwości antyoksydacyjne i przeciwbakteryjne otrzymanych biomateriałów [1-3]. Dzięki temu materiały te znajdują zastosowanie m.in. w opatrunkach wspomagających gojenie ran oraz w systemach przeznaczonych do regeneracji skóry.

Podziękowanie: Niniejsze badania zostały sfinansowane ze środków Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu przeznaczonych na utrzymanie potencjału badawczego oraz w ramach konkursu „Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza” dla Priorytetowego Zespołu Badawczego „EPIBIOMAT Research Group – Epibiocompatible Materials for Medicine and One Health”.

Literatura:

- [1] Kaczmarek-Szczepańska Beata, Zasada Lidia Iga, D'Amora Ugo, Pałubicka Anna, Ronowska Anna, Wekwejt Marcin, Bioactivation of konjac glucomannan films by tannic acid and gluconolactone addition, ACS Applied Materials & Interfaces 16 (2024) 46102-46112.
- [2] Kaczmarek-Szczepańska Beata, Kleszczyński Konrad, Zasada Lidia, Chmielniak Dorota, Hollerung Mara Barbara, Dembińska Katarzyna, Pałubicka Krystyna, Steinbrink Kerstin, Swiontek Brzezinska Maria, Grabska-Zielińska Sylwia, Hyaluronic acid/ellagic acid as materials for potential medical application, International Journal of Molecular Sciences 25 (2024) 5891.
- [3] Kaczmarek-Szczepańska Beata*, Wekwejt Marcin, Pałubicka Anna, Michno Anna, Zasada Lidia, Alsharabasy Amir, Cold plasma treatment of tannic acid as a green technology for the fabrication of advanced cross-linkers for bioactive collagen/gelatin hydrogels, International Journal of Biological Macromolecules 258 (2024) 128870.



S03 WS10

Polimerowe systemy do dostarczania substancji aktywnych przez skórę

Justyna Kozłowska

*Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń;
Instytut Studiów Zaawansowanych Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Wileńska 4, 87-100
Toruń
justynak@umk.pl*

Skuteczność preparatów dermatologicznych zależy nie tylko od rodzaju zastosowanej substancji aktywnej, lecz również od właściwości formułacji wpływających na jej stabilność, uwalnianie oraz oddziaływanie ze skórą. Szczególne znaczenie ma warstwa rogowa naskórka (*stratum corneum*), stanowiąca główną barierę ograniczającą przenikanie substancji aplikowanych miejscowo.

Jednym z kierunków badań nad zwiększeniem efektywności działania substancji aktywnych jest ich enkapsulacja w mikrocząstkach polimerowych. W ramach prowadzonych badań opracowano mikrocząstki na bazie polimerów naturalnych i syntetycznych, zawierające wybrane składniki aktywne. Zastosowanie różnych materiałów polimerowych oraz metod otrzymywania i sieciowania mikrocząstek pozwoliło na modyfikowanie ich właściwości, stabilności oraz profilu uwalniania enkapsulowanych składników.

Kolejnym etapem było wprowadzenie mikrocząstek do materiałów polimerowych przeznaczonych do bezpośredniej aplikacji na skórę. Opracowano trójwymiarowe porowate matryce, hydrogele, cienkie filmy oraz materiały emulsyjne, wykorzystując m.in. kolagen, żelatynę, hydroksyetylocelulozę, alginian sodu i karagen. Wykazano, że zarówno skład matrycy, jak i rodzaj oraz zawartość mikrocząstek wpływały na właściwości fizykochemiczne otrzymanych materiałów, w tym ich strukturę, właściwości mechaniczne, zdolność do pęcznienia i stabilność. Szczególnie istotny był wpływ konstrukcji materiału na uwalnianie substancji aktywnych. Inkorporacja mikrocząstek w porowate matryce umożliwiła spowolnienie uwalniania ekstraktu roślinnego i uzyskanie dwustopniowego przebiegu tego procesu.

W dalszych badaniach materiały modyfikowano również dodatkiem promotorów przenikania oraz składników lipidowych, uzyskując m.in. filmy i porowate materiały emulsyjne. Badania aplikacyjne wybranych formułacji wykazały zwiększenie nawilżenia skóry oraz niewielkie i odwracalne obniżenie jej barierowości bez działania drażniącego.

Uzyskane wyniki wskazują, że połączenie enkapsulacji substancji aktywnych z ich wprowadzaniem do odpowiednio zaprojektowanych matryc polimerowych pozwala modyfikować zarówno właściwości materiału, jak i profil uwalniania składników aktywnych. Opracowane systemy mogą stanowić podstawę nowych formułacji przeznaczonych do zastosowań dermatologicznych.

Podziękowania

Badania zostały sfinansowane w ramach programu „Inicjatywa Doskonałości - Uczelnia Badawcza”



S03 WS11

Zależności struktura–aktywność porfirynoidów w fotoinaktywacji drobnoustrojów i terapii fotodynamicznej nowotworów

Janusz M. Dąbrowski

Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński

ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków; jdabrows@chemia.uj.edu.pl

Zrozumienie zależności między strukturą fotosensybilizatora (PS) a jego aktywnością biologiczną stanowi podstawę racjonalnego projektowania związków przeznaczonych do przeciwdrobnoustrojowej terapii fotodynamicznej (aPDT) oraz terapii fotodynamicznej nowotworów (PDT). Chociaż oba podejścia wykorzystują wzbudzenie PS światłem i wytwarzanie reaktywnych form tlenu (ROS), działają w zasadniczo odmiennych układach biologicznych. W aPDT o skuteczności decydują przede wszystkim dostęp PS do komórek drobnoustrojów, jego oddziaływanie z osłonami komórkowymi oraz penetracja biofilmu. W PDT nowotworów równie istotne są farmakokinetyka, dystrybucja tkankowa, akumulacja w guzie i lokalizacja subkomórkowa. Porfirynoidy stanowią dogodną platformę do badania tych zależności, ponieważ ich ładunek, lipofilowość oraz właściwości optyczne, redoksove i fotochemiczne można precyzyjnie modyfikować [1-2].

W aPDT szczególne znaczenie mają całkowity ładunek cząsteczki i jego przestrzenne rozmieszczenie, warunkujące oddziaływania z anionowymi składnikami osłon komórkowych, zwłaszcza bakterii Gram-ujemnych. Akumulacja PS i jego lokalizacja zależą również od lipofilowości, geometrii podstawników oraz skłonności do agregacji. Wprowadzenie jonu metalu do makrocyklu pozwala regulować wydajność przejścia międzysystemowego, czas życia stanu trypletowego, właściwości redoksove oraz mechanizmy fotochemiczne. Skuteczna fotoinaktywacja wymaga zatem równoczesnego dostrojenia rozpuszczalności, fotostabilności, rozkładu ładunku i wydajności generowania ROS. Aktywność, szczególnie wobec bakterii Gram-ujemnych, można dodatkowo zwiększać za pomocą odpowiednio dobranych adiuwantów [2]. W PDT nowotworów priorytety są odmienne. Przesunięcie absorpcji w kierunku bliskiej podczerwieni zwiększa użyteczny zasięg światła w tkance, lecz samo nie gwarantuje skuteczności terapii. Struktura PS i jego formuła muszą jednocześnie ograniczać agregację, zapewniać właściwy profil farmakokinetyczny, sprzyjać akumulacji w guzie oraz kierować PS do struktur komórkowych podatnych na uszkodzenia fotodynamiczne. Znaczenie ma również zdolność do generowania ROS przy zróżnicowanym natlenieniu guza, ponieważ charakter uszkodzeń oksydacyjnych wpływa nie tylko na bezpośrednią cytotoksyczność, lecz także na immunogenność śmierci komórek nowotworowych, aktywację odpowiedzi przeciwnowotworowej oraz rozwój długotrwałej pamięci immunologicznej. Udział mechanizmów typu I i II powinien zatem być dostosowany do mikrośrodowiska nowotworu [1].

Podczas wykładu porównane zostaną zależności struktura–właściwości–aktywność w aPDT i PDT nowotworów. Omówiony zostanie wpływ rodzaju makrocyklu i jonu metalu, charakteru i rozmieszczenia podstawników, asymetrii cząsteczki oraz formuacji na absorpcję światła, dynamikę stanów wzbudzonych, mechanizmy generowania ROS, agregację, farmakokinetykę i selektywność biologiczną. Porównanie to pokaże, że obecnie nie poszukuje się ‘idealnego fotosensybilizatora’, lecz uniwersalnej platformy projektowej, którą można dostosować do odmiennej biologii zakażeń bakteryjnych i nowotworów.

1. M. Warszńska, P. Repetowski, J. M. Dąbrowski, *Coord. Chem. Rev.* **2023**, 495, 215350
2. D. Barczyk, D. M. Todor, P. Repetowski, M. Warszńska, J. M. Dąbrowski, *Coord. Chem. Rev.* **2026**, 567, 218272.

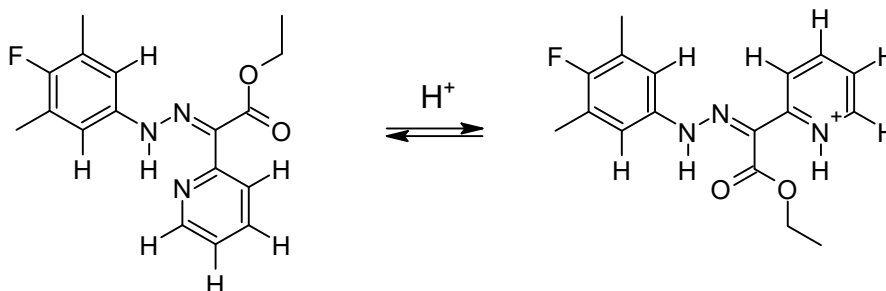
Podziękowania: Praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Nauki (NCN) w ramach realizacji grantów nr 2024/55/B/NZ7/03169 oraz nr 2020/37/B/NZ7/04157.

Fluorowane przełączniki hydrazonowe jako inteligentne sondy do ratiometrycznego obrazowania pH w ^{19}F MRI

Tomasz Krawczyk, Awais Ali Aslam, Gabriela Pastuch-Gawolek, Ewelina Pilny, Krzysztof Jasiński, Władysław P. Węglarz

*Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, Katedra Technologii Chemicznej Organicznej i Petrochemii
ul. Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice adres korespondencyjny
tomasz.krawczyk@polsl.pl*

Hydrazonowe przełączniki molekularne stanowią obiecującą klasę związków, przydatną do obrazowania pH za pomocą spektroskopii ^{19}F NMR. Ich działanie opiera się na odwracalnej izomeryzacji E/Z. Zachodzi ona w wyniku protonowania cząsteczki przełącznika i powoduje charakterystyczne zmiany w widmach ^1H i ^{19}F NMR [1]. Badania zależności struktura-właściwości we fluorowanych przełącznikach hydrazonowych ujawniły liniową zależność pomiędzy stałymi Hammetta a wartością pH, przy której następuje przełączanie. Zależnie od natury podstawników możliwa jest łatwa modyfikacja pK_a przełącznika w zakresie 2-6 co stwarza możliwość zastosowań do obrazowania pH w warunkach fizjologicznych [2].



Rys. 1. Przykładowy hydrazonowy przełącznik molekularny.

Zależnie od budowy sondy molekularnej dostępne są dwie strategie odczytu sygnału w ^{19}F MRI. Pierwsza polega na rejestracji dwóch obrazów dla sygnałów o różnych przesunięciach chemicznych charakterystycznych dla form E i ZH^+ . Synteza wybranych pochodnych pozwoliła osiągnąć modulację przesunięcia chemicznego w ^{19}F NMR około 5 ppm dla pojedynczego atomu fluoru bezpośrednio związanego z pierścieniem aromatycznym przełącznika (w porównaniu z ok. 2 ppm dla grup $-\text{CF}_3$ lub $-\text{SF}_5$).

Druga strategia wymaga wprowadzenia do szkieletu przełącznika centrum paramagnetycznego. Takie rozwiązanie pozwala na obrazowanie pH na podstawie zmian szybkości relaksacji przy jednoczesnym monitorowaniu pojedynczego, wąskiego sygnału ^{19}F [3].

Wstępna ocena biologiczna rozpuszczalnych w wodzie analogów wykazała niską cytotoksyczność zarówno na komórki HeLa, jak i na mezenchymalne komórki macierzyste tkanki tłuszczowej (ADSC). Uzyskane wyniki potwierdzają bezpieczeństwo tych związków i uzasadniają dalszy rozwój w kierunku zastosowań biomedycznych do ilościowego, wolnego tła i multispektralnego obrazowania pH w złożonych układach biologicznych.

- [1] D. Janasik, K. Jasiński, W. P. Węglarz, I. Nemec, P. Jewula, T. Krawczyk, Anal Chem 2022, 94, 3427.
- [2] D. Janasik, K. Jasiński, J. Szreder, W. P. Węglarz, T. Krawczyk, ACS Sens 2023, 8, 1971.
- [3] D. Janasik, P. Imielska, T. Krawczyk, ACS Sens 2023, 8, 721.



S03 WS13

Chemiczne i biologiczne podstawy dendroremediacji arsenu: od przemian form chemicznych do długoterminowego oczyszczania środowiska

Sylwia Budzyńska

*Katedra Chemii, Wydział Leśny i Technologii Drewna, Uniwersytet Przyrodniczy w Poznaniu;
ul. Wojska Polskiego 75, 60-625 Poznań;
sylwia.budzyńska@up.poznan.pl*

Arsen należy do najbardziej problematycznych zanieczyszczeń środowiska ze względu na swoją toksyczność, trwałość oraz możliwość występowania w formach chemicznych o różnej mobilności, biodostępności i oddziaływaniu na organizmy. Szczególne zagrożenie stanowią tereny pogórnice i poprzemysłowe oraz zbiorniki osadów poftlotacyjnych, z których arsen może być stopniowo uwalniany do gleb, wód i łańcuchów pokarmowych. Jednym z perspektywicznych sposobów ograniczania tego zagrożenia jest dendroremediacja, wykorzystująca zdolność drzew do pobierania, stabilizacji i długoterminowej akumulacji zanieczyszczeń.

Skuteczność tego procesu zależy jednak nie tylko od całkowitej ilości arsenu pobranej przez roślinę, lecz także od jego formy chemicznej, przemian zachodzących w ryzosferze i tkankach oraz uruchamianych mechanizmów tolerancji i detoksykacji. Aby jednoznacznie określić mechanizmy odpowiedzialne za pobieranie, przemiany, transport i detoksykację arsenu w drzewach, konieczne jest połączenie wyników badań prowadzonych w warunkach hydroponicznych, donicowych oraz terenowych. Uwzględnienie różnych etapów rozwoju roślin, zróżnicowanego czasu ekspozycji oraz odmiennych form chemicznych arsenu, takich jak As(III), As(V) i kwas dimetyloarsenowy, umożliwia ocenę tego, w jakim stopniu dynamika tych procesów zależy od formy chemicznej metaloidu, czasu oddziaływania oraz właściwości badanego gatunku. Wykazano, że pobieranie, transport i toksyczność arsenu są procesami dynamicznymi, zależnymi od jego formy, czasu ekspozycji oraz gatunku drzewa. Obserwowane przemiany wskazują na aktywną rolę korzeni i mikroorganizmów ryzosferowych, natomiast identyfikacja kompleksu As(III) z fitochelatyną potwierdza znaczenie wewnątrzkomórkowego wiązania arsenu w mechanizmach jego detoksykacji.

Znaczenie badań krótkoterminowych zweryfikowano w doświadczeniach wieloletnich. W układach z udziałem klasycznych gatunków drzew leśnych, dębu szypułkowego (*Quercus robur* L.) i lipy drobnolistnej (*Tilia cordata* Mill.), obserwowano sukcesywną akumulację arsenu w biomasie oraz spadek jego całkowitej zawartości w glebie o około 72% w ciągu pięciu lat. Jednocześnie zmniejszał się udział bardziej mobilnej formy As(III), a wzrastało znaczenie innych, w tym organicznych form arsenu. Naturalne pojawianie się drzew na silnie zanieczyszczonych terenach dodatkowo wskazuje, że spontaniczna sukcesja może dostarczać istotnych informacji przy wyborze gatunków do działań naprawczych.

Badania realizowane obecnie rozszerzają tę problematykę o najwcześniejsze etapy rozwoju drzew, czasozależne zmiany form arsenu, jego rozmieszczenie w organach oraz fizjologiczne mechanizmy tolerancji. Połączenie analiz chemicznych i biologicznych, opartych na ugruntowanych podstawach wiedzy z zakresu nauk leśnych, z obserwacjami długoterminowymi pozwala traktować dendroremediację nie jako prosty proces usuwania arsenu, lecz jako dynamiczny układ przemian decydujących o mobilności, toksyczności i trwałej stabilizacji tego metaloidu w środowisku.

Badania sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki (NCN) przyznanych na podstawie umowy nr UMO-2023/51/D/NZ9/00817 w ramach projektu pt. *Dendroremediacja arsenu - czasozależna dynamika akumulacji, transformacji i mechanizmów tolerancji form metaloidu u wybranych gatunków drzew leśnych*.

Nanoplastiki na granicy faz: jak właściwości powierzchniowe polimerów determinują ich oddziaływania z błonami biologicznymi

Monika Naumowicz¹, Marcin Zajac^{2,3}, Joanna Kotyńska¹

¹ Pracownia Bioelektrochemii, Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok

² Szkoła Doktorska, Uniwersytet w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok

³ Zakład Chemii Organicznej, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku, ul. Mickiewicza 2A, 15-222 Białystok
monikan@uwb.edu.pl

Gwałtowny rozwój przemysłu tworzyw sztucznych doprowadził do powszechnego występowania nanoplastików w środowisku, a ich obecność wykazano w wielu tkankach i płynach ustrojowych organizmów żywych. Zdolność tych cząstek do pokonywania barier biologicznych, akumulacji w tkankach oraz oddziaływania z błonami komórkowymi sprawia, że ich wpływ na funkcjonowanie organizmów staje się przedmiotem coraz bardziej intensywnych badań. Pomimo rosnącej liczby doniesień dotyczących skutków ich ekspozycji, mechanizmy oddziaływania nanoplastików z układami biologicznymi, zwłaszcza na poziomie procesów międzyfazowych, pozostają nadal słabo poznane. Dlatego badania *in vitro* koncentrują się na wyjaśnieniu procesów odpowiedzialnych za oddziaływanie nanoplastików z błonami oraz komórkami eukariotycznymi i prokariotycznymi. W tym kontekście chciałabym podsumować wyniki naszych badań dotyczących wpływu nanocząstek polistyrenowych na wybrane układy biologiczne.

Główne cele prowadzonych badań obejmowały: i) ocenę wpływu wielkości i funkcjonalizacji powierzchni nanocząstek na właściwości fizykochemiczne oraz integralność barier komórkowych; ii) określenie mechanizmów ich oddziaływań z elementami morfotycznymi krwi, liniami komórkowymi o różnej specyficzności tkankowej oraz mikroorganizmami; iii) charakterystykę procesów adsorpcji nanocząstek w warstwie międzyfazowej oraz ocenę wywołanych przez nie zmian w ładunku powierzchniowym rozpatrywanych układów biologicznych.

W badaniach zastosowano interdyscyplinarne podejście, łączące analizę fizykochemiczną i biologiczną modeli biologicznych obejmujących komórki ssaków (erytrocyty, trombocyty i linie komórkowe) oraz mikroorganizmy, takie jak bakterie i drożdżaki. Stabilność koloidalną nanocząstek oraz parametry elektrokinetyczne komórek oceniano metodami DLS i ELS, natomiast bezpośrednie interakcje strukturalne analizowano z wykorzystaniem FTIR. Modyfikacje topografii i morfologii powierzchni obrazowano mikroskopią AFM i SEM, podczas gdy odpowiedź biologiczną i potencjał cytotoksyczny szacowano przy użyciu testów metabolicznych oraz parametrów przeżywalności mikroorganizmów i komórek.

Uzyskane wyniki wskazują, że odpowiedź układów biologicznych na obecność nanoplastików jest determinowana nie tylko przez rozmiar i stężenie cząstek, lecz przede wszystkim przez ich właściwości powierzchniowe, skład środowiska jonowego oraz procesy zachodzące na granicy faz. Analizy wykazały, że cząstki polistyrenowe mogą modyfikować właściwości powierzchniowe komórek, wpływać na parametry elektrokinetyczne błon biologicznych oraz indukować zróżnicowane efekty biologiczne – od zmian adaptacyjnych po działania cytotoksyczne.



S03 WS15

Peptydowe inhibitory tworzenia kompleksu BTLA/HVEM – projektowanie, synteza i ocena aktywności

Marta Spodzieja¹, Katarzyna Kuncewicz¹, Magdalena Lipińska¹, Bartosz Bigielmajer¹, Piotr Ciura¹, Adam Sieradzan¹, Katarzyna Węgrzyn², Peter Steinberger³, Anna Wardowska⁴, Sylwia Rodziewicz-Motowidło¹.

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

²Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii Uniwersytetu Gdańskiego i Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego, 80-307 Gdańsk, Abrahama 58

³Uniwersytet Medyczny w Wiedniu, Instytut Immunologii, 1090 Wiedeń, Lazarettgasse 19

⁴Gdański Uniwersytet Medyczny, Wydział Lekarski, 80-214 Gdańsk, Smoluchowskiego 17
marta.spodzieja@ug.edu.pl

Atenuator limfocytów B i T (BTLA) oraz mediator wejścia wirusa opryszczki (HVEM) należą do punktów kontrolnych układu odpornościowego. Białka te uczestniczą w regulacji odpowiedzi immunologicznej i utrzymaniu homeostazy organizmu. Interakcja BTLA z HVEM ogranicza aktywność limfocytów T, hamując ich proliferację, produkcję cytokin oraz funkcje efektorowe. Zaburzenia funkcjonowania tej osi obserwuje się w przebiegu wielu chorób. Zwiększoną ekspresję obu białek opisano między innymi w czerniaku, raku żołądka i raku wątrobowokomórkowym, gdzie może ona osłabiać odpowiedź przeciwnowotworową oraz sprzyjać ucieczce komórek nowotworowych spod nadzoru układu odpornościowego. Kompleks BTLA/HVEM może również odgrywać rolę w rozwoju chorób autoimmunologicznych. U pacjentów z toczniem rumieniowatym układowym ekspresja BTLA i HVEM na regulatorowych limfocytach T może zaburzać ich funkcję supresorową i przyczyniać się do progresji choroby. Z tego względu oś BTLA/HVEM jest rozważana jako potencjalny cel terapeutyczny zarówno w chorobach nowotworowych, jak i autoimmunologicznych^{1,2}.

Prowadzone przez nas badania koncentrowały się na opracowaniu peptydowych inhibitorów tworzenia kompleksu BTLA/HVEM. Peptydy projektowano na podstawie sekwencji aminokwasowych białek BTLA, HVEM, glikoproteiny D wirusa opryszczki, białka UL144 ludzkiego cytomegalowirusa, białka adhezyjnego SALM5 oraz antygeny różnicowania komórkowego CD160³. Zdolność peptydów do wiązania BTLA lub HVEM oceniano za pomocą termoforezy mikroskalowej lub plazmonowego rezonansu powierzchniowego. Ich zdolność do hamowania tworzenia kompleksu BTLA/HVEM analizowano za pomocą testów ELISA oraz badań komórkowych. Dla najbardziej aktywnych związków oceniono także stabilność, bezpieczeństwo biologiczne oraz wpływ na wybrane funkcje limfocytów T pochodzących od osób zdrowych i pacjentów z czerniakiem.

Uzyskane wyniki pozwoliły wyłonić peptydy skutecznie blokujące tworzenie kompleksu BTLA/HVEM. Wybrane związki wpływały również między innymi na aktywację i proliferację komórek T. Wyniki te wskazują, że opracowane peptydy mogą stanowić punkt wyjścia do rozwoju nowych immunomodulatorów ukierunkowanych na oś BTLA/HVEM.

Badania zostały sfinansowane ze środków NCN w ramach projektu OPUS 22 nr 2021/43/B/NZ7/01022 pt. „Nowe immunomodulatory kompleksu BTLA-HVEM jako potencjalna terapia w toczniu rumieniowatym układowym”.

1. D.M. Pardoll, *Nature Reviews Cancer* **2012**, 12, 252–264.

2. J.R. Sedy et al., *Nature Immunology* **2005**, 6, 90–98.

3. K. Wojciechowicz et al., *European Journal of Medicinal Chemistry* **2024**, 268, 116231.



S03 WS16

Peptydomimetyki DAPEG: jeden blok budulcowy, cztery klasy funkcji

Magdalena Wysocka, Wiktoria Mallek, Gabriela Mirecka, Agnieszka Piwkowska, Adam Lesner

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

magdalena.wysocka@ug.edu.pl

Peptydy penetrujące komórki (CPP) należą do wiodących niewirusowych nośników kwasów nukleinowych i białek. Zastosowanie struktur zbudowanych z natywnych α -aminokwasów ogranicza jednak ich podatność na proteolizę, cytotoksyczność zależną od dawki oraz uwięzienie przenoszonego ładunku w endosomach. Peptydomimetyki omijają te bariery dzięki zastąpieniu szkieletu peptydowego lub wbudowaniu w niego glikolu polietylenowego. Polimery DAPEG, zbudowane z N-podstawionego kwasu L-2,3-diaminopropionowego (Dap) z bocznymi ramionami PEG zakończonymi resztą guanidyniową, opracowano na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. Otrzymuje się je metodą wspomaganą mikrofalowo syntezy Fmoc-SPPS, z wykorzystaniem pojedynczego, ortogonalnie zabezpieczonego bloku budulcowego Fmoc-L-Dap(Mtt)-OH, zastąpionego w wariantach polimerowych analogiem z grupą ivDde. Ten sam blok budulcowy, bez zmiany szkieletu ani drogi syntezy, obsłużył sześć zastosowań w czterech klasach funkcji.

- **Detekcja.** Fluorogeniczne substraty proteaz: biblioteka dla proteazy serynowej neutrofilów 4 (NSP4) z 2016 roku oraz substrat podjednostki $\beta 2$ proteasomu 20S, wykrywający aktywność proteasomu w moczu chorych na raka pęcherza moczowego, z 2020 roku.
- **Dostarczanie kwasów nukleinowych.** Guanidynylowane polimery $O2Oc-[Dap(GO2)]_n-O2Oc-NH_2$ ($n = 4, 6, 8$) kondensujące plazmidowe DNA i pośredniczące w transfekcji genem GFP, z 2021 roku, oraz warianty N-acylowane łańcuchami od C2 do C16, badane w sferoidach HEK-293T, z 2025 roku.
- **Dostarczanie białek.** Biotynylowane polimery DAPEG jako nośniki czynnego, wielopodjednostkowego enzymu w liniach komórek gruczołu piersiowego, z 2024 roku.
- **Dostarczanie leku.** Koniugaty doksorubicyny przyłączonej metodą click do oktaguanidyniowego rdzenia DAPEG, z 2026 roku. Wariant z łącznikiem heksynoilowym zachował aktywność wobec HER2-dodanych sferoidów, przy jednoczesnym wykazaniu 15-krotnie mniejszej toksyczności wobec prawidłowego nabłonka piersi (HB2) oraz ponad 18-krotnie mniejszej wobec kardiomiocytów (AC16).

W obu badanych seriach zależność między strukturą DAPEG a wydajnością transfekcji okazała się niemonotoniczna. W serii z 2021 roku najwyższą skuteczność wykazywał heksamer, choć wszystkie warianty wiązały dwuniciowe DNA w zbliżonym zakresie mikromolarnym. Obrazowanie metodą mikroskopii sił atomowych wskazuje, że o wyniku decyduje rozmiar kompleksu, a nie siła wiązania: heksamer tworzy struktury kwiatopodobne o średnicy około 900 nm, podczas gdy oktagamer formuje zwoje o wielkości 2,35 μm , zbyt duże dla wydajnego wychwyty komórkowego. Analogiczną zależność zaobserwowano dla długości N-końcowego łańcucha acylowego w serii związków lipidowanych. Skuteczność układu wynika z równowagi między wiązaniem kwasu nukleinowego, rozmiarem powstających kompleksów i wydajnością ich internalizacji.



Komunikaty sekcyjne



S03 KS01

Oznaczanie w próbkach biologicznych (mocz) lotnych markerów narażenia na substancje toksyczne z wykorzystaniem sprzężonych technik chromatograficznych

Tomasz Ligor^{1,2}, Magdalena Ligor^{1,2}, Laura Stojaczyk^{1,2}

¹*Katedra Chemii Środowiska i Bioanalityki, Wydział Chemii,
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń*

²*Instytut Studiów Zaawansowanych,
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Wileńska 4, 87-100 Toruń
e-mail: mligor@umk.pl*

Analiza moczu od dawna jest jednym z podstawowych narzędzi toksykologii klinicznej. Kluczową rolę w procesie detoksykacji organizmu pełnią nerki. Ich zadaniem jest filtracja krwi, usuwanie zbędnych produktów przemiany materii oraz eliminacja wielu substancji toksycznych wraz z ich metabolitami. Kluczową rolę odgrywają filtracja, sekrecja i resorpcja kanalikowa, a także metabolizm wątrobowy, prowadzący do powstawania metabolitów polarnych. Eliminacja substancji toksycznych z moczem zależy od właściwości chemicznych danego związku, jego metabolizmu, sprawności i funkcji nerek oraz warunków fizjologicznych pacjenta. Badanie moczu pozwala określić, jakie toksyny zostały wchłonięte, w jakich ilościach oraz jak przebiega proces ich eliminacji. Zrozumienie dynamiki wydalania toksyn z moczem ma ważne znaczenie diagnostyczne. Badanie mechanizmów eliminacji toksyn ma kluczowe znaczenie dla diagnozy, leczenia i oceny ryzyka zatrucia. Różnice między toksynami lipofilnymi a hydrofilnymi, rola pH moczu i transportu kanalikowego, a także złożone interakcje metaboliczne sprawiają, że ocena dynamiki wydalania jest ważnym zagadnieniem toksykologicznym. Szybkość wydalania substancji toksycznych zależy w dużej mierze od budowy i charakteru chemicznego danej substancji. Substancje hydrofilne są zwykle szybko usuwane z moczem. Substancje lipofilne odkładają się w tkance tłuszczowej, a przed eliminacją muszą zostać przekształcone w metabolity bardziej polarne. Związki o małej masie cząsteczkowej łatwiej opuszczają organizm. Związki duże lub obojętne elektrycznie częściej wymagają metabolizmu wątrobowego. Substancje silnie związane z albuminami są słabo filtrowane przez nerki i mogą utrzymywać się w organizmie dłużej. Badania dynamiki wydalania toksyn z moczem mają szerokie zastosowania w diagnostyce zatruc, monitorowaniu leczenia, medycynie sądowej, ochronie środowiska i epidemiologii. Zastosowanie chromatografii gazowej (GC), szczególnie chromatografii gazowej sprzężonej ze spektrometrią mas (GC-MS), w analizie moczu polega na rozdzielaniu, identyfikacji i oznaczaniu ilościowym lotnych i półlotnych związków organicznych obecnych w próbce. Główne obszary zastosowania sprzężonych technik chromatograficznych w analizie moczu obejmują: diagnostykę chorób metabolicznych (profilowanie metaboliczne), toksykologię i kryminalistykę (zatrucia oraz narażenie na substancje psychotropowe i ich metabolity, w tym do określania czasu, jaki minął od zażycia substancji) oraz analitykę kliniczną (oznaczanie specyficznych biomarkerów, monitorowanie terapeutyczne leków, precyzyjne oznaczanie stężenia leków w celu optymalizacji terapii).

Podziękowania: T. Ligor, M. Ligor, L. Stojaczyk są członkami zespołu badawczego CURE - Cutting-edge Unified Research in Experimental Medicine, który funkcjonuje w ramach Priorytetowego Obszaru Badawczego Discovery, Diagnostics, Therapy for Healthcare (D2TH), wyróżnionego w konkursie realizowanym w ramach programu „Inicjatywa doskonałości – uczelnia badawcza” (IDUB).

Systemowe zmiany metaboliczne związane z rakiem endometrium z wykorzystaniem metabolomiki GC-MS osocza

Julia Zelkowska¹, Patrycja Mojsak¹, Krzysztof Sołowiej¹, Paweł Knapp², Adam Kretowski^{1,3}, Michał Ciborowski^{1,4}, Joanna Godzien¹

¹Laboratorium Metabolomiki i Proteomiki, Centrum Badań Klinicznych, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku (UMB), Białystok;

²Klinika Ginekologii Onkologicznej z Chemioterapią, UMB, Białystok;

³Klinika Endokrynologii, Diabetologii i Chorób Wewnętrznych, UMB, Białystok;

⁴Zakład Biochemii Lekarskiej, UMB, Białystok

julia.zelkowska@umb.edu.pl

Rak endometrium (EC) jest jednym z najczęściej występujących nowotworów ginekologicznych, a częstość jego występowania stale wzrasta. Rozwój EC wiąże się z zaburzeniami homeostazy metabolicznej, jednak ich odzwierciedlenie w systemowym profilu metabolicznym pozostaje nie w pełni poznane. Metabolomika umożliwia kompleksową charakterystykę tych zmian oraz identyfikację zaangażowanych szlaków metabolicznych. Celem badania była charakterystyka profilu metabolicznego osocza pacjentek z EC z wykorzystaniem niecelowanej metabolomiki GC-MS oraz wyodrębnienie głównych szlaków metabolicznych związanych z chorobą.

Badanie przeprowadzono na próbkach osocza pobranych od 63 pacjentek z EC oraz 74 osób z grupy kontrolnej. Niecelowaną analizę metabolomiczną wykonano z wykorzystaniem GC-MS. Próbkę osocza przygotowano z zastosowaniem dwuetapowej procedury derywatyzacji metabolitów. Analizę statystyczną przeprowadzono przy użyciu testu U Manna-Whitneya, natomiast w analizie wielowymiarowej zastosowano ortogonalną analizę dyskryminacyjną metodą cząstkowych najmniejszych kwadratów (OPLS-DA).

Analiza wielowymiarowa wykazała wyraźne różnice w profilach metabolicznych osocza pacjentek z EC i osób z grupy kontrolnej ($R^2 = 0,752$, $Q^2 = 0,593$, CV-ANOVA $p = 1,029 \times 10^{-21}$). Spośród 41 metabolitów, których poziomy różniły się między badanymi grupami, znaczną część stanowiły kwasy tłuszczowe oraz cząsteczki związane z metabolizmem energetycznym. U pacjentek z EC obserwowano wyższy poziom szeregu kwasów tłuszczowych, zarówno nasyconych, jak i nienasyconych, w tym kwasu palmitynowego ($p < 0,0001$), palmitooleinowego ($p < 0,0001$), stearynowego ($p = 0,0059$), oleinowego ($p < 0,0001$) i linolowego ($p < 0,0001$). Wyższe były również poziomy kwasów 2- i 3-hydroksymasłowych ($p < 0,0001$), podczas gdy poziom glukozy ($p < 0,0001$) oraz tryptofanu ($p = 0,0005$) były niższe. Analiza szlaków metabolicznych potwierdziła, że zmiany nie ograniczały się do pojedynczych metabolitów, lecz obejmowały skoordynowane zaburzenia metabolizmu kwasów tłuszczowych, aminokwasów rozgałęzionych i aromatycznych oraz szlaków związanych z metabolizmem węglowodanów i maślanu.

Uzyskane wyniki wskazują, że EC wiąże się z wyraźnymi zmianami systemowego profilu metabolicznego, obejmującymi przede wszystkim gospodarkę lipidową i energetyczną oraz metabolizm aminokwasów. Obserwowany wzorzec wskazuje na współwystępowanie zaburzeń wielu powiązanych szlaków metabolicznych i stanowi podstawę do dalszych badań nad metabolicznymi mechanizmami związanymi z rozwojem EC.

Podziękowanie: Badanie zostało ufundowane przez Narodowe Centrum Nauki (NCN), projekt PRELUDIUM-24 pt. „ECLECTIC: Wielowarstwowa ocena raka endometrium z wykorzystaniem danych klinicznych, metabolomicznych, histologicznych i molekularnych w ujęciu translacyjnym” (numer grantu: 2025/57/N/NZ7/03555). Julia Zelkowska jest stypendystką korzystającą ze wsparcia finansowego Fundacji na rzecz Nauki Polskiej (FNP).



S03 KS03

Porównawcza analiza metabolomiczna toksyczności nanocząstek srebra i złota u larw *Galleria mellonella*

Weronika Skorupińska¹, Adam Junka², Piotr Młynarz¹

Katedra Biochemii, Biologii Molekularnej i Biotechnologii, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska
Ul. Wybrzeże Wyspiańskiego 2, 50-370 Wrocław

P.U.M.A – Pracownia Unikalnych Modeli Aplikacyjnych, Zakład Technologii Translacyjnych, Wydział Farmaceutyczny, Uniwersytet Medyczny we Wrocławiu

Ul. Borowska 211, 50-534 Wrocław

weronika.lojewska@pwr.edu.pl

Nanocząstki srebra i złota są szeroko stosowane w biomedycynie. Jednak mimo ich potencjału terapeutycznego nadal brakuje szczegółowych badań wyjaśniających wpływ nanocząstek na metabolizm organizmów żywych, zwłaszcza w odniesieniu do kompleksowej charakterystyki zmian i zaangażowanych szlaków metabolicznych [1].

Model *Galleria mellonella* jest coraz częściej wykorzystywany w nanotoksykologii ze względu na rozwinięty układ odpornościowy, prostotę oraz ekonomię hodowli, a także dobrą zgodność odpowiedzi fizjologicznych z modelami ssaczymi [2, 3].

Celem niniejszego badania była ocena wpływu nanocząstek srebra i złota na metabolizm larw *Galleria mellonella* z wykorzystaniem analiz metabolomicznych opartych na spektroskopii protonowego magnetycznego rezonansu jądowego. Larwy o standaryzowanej masie 220-270 mg poddano iniekcji nanocząstkami srebra lub złota w różnych dawkach (0,1-100 µg/larwa). Następnie przygotowano ekstrakty metaboliczne z wykorzystaniem ekstrakcji metodą Folcha i wykonano analizę metodą ¹H NMR.

Najbardziej wyraźne zmiany dotyczyły metabolizmu energetycznego, konkretnie poziomu mleczanu, bursztynianu i fumaranu, które sugerują zaburzenia glikolizy oraz cyklu TCA. Obserwowane są również istotne dysregulacje metabolizmu aminokwasów. Zmiany dotyczyły szczególnie aminokwasów rozgałęzionych (waliny, leucyny, izoleucyny). Co więcej odnotowano zaburzenia metabolitów cholinowych związane z metabolizmem fosfolipidów błonowych. Ich zmieniony poziom może sugerować uszkodzenia błon, remodeling błon komórkowych oraz stres oksydacyjny indukowany przez nanocząstki. Zaobserwowano dwa odmienne typy odpowiedzi metabolicznej. Nanocząstki srebra (AgNPs) wywołują intensywniejszy stres metaboliczny, bardziej nasilone zaburzenia energetyczne, oraz silniejszy cytotoksyczny efekt. Natomiast nanocząstki złota (AuNPs) powodują bardziej uporządkowaną odpowiedź adaptacyjną. Zarówno AgNPs, jak i AuNPs wpływają na metabolizm *Galleria mellonella*, jednak srebro indukuje wyraźnie silniejsze zaburzenia metaboliczne.

Uzyskane wyniki wskazują również, że metabolomika oparta na NMR stanowi cenne narzędzie do oceny nanotoksyczności. Planowane badania z wykorzystaniem LC-MS pozwolą na dalszą walidację uzyskanych obserwacji.

[1] "Current Overview of Metal Nanoparticles' Synthesis, Characterization, and Biomedical Applications, with a Focus on Silver and Gold Nanoparticles. Pharmaceuticals", Burlec, A. F., Corciova, A., Boev, M., Batir-Marin, D., Mircea, C., Cioanca, O., Danila, G., Danila, M., Bucur, A. F., & Hancianu, M. (2023). , 16(10), 1410. <https://doi.org/10.3390/ph16101410>

[2] "Systematic Review of Artificial Intelligence use in behavioral analysis of invertebrate and larval model organisms: Methods, Applications and Future Recommendations", Zuzanna Stepnicka, Natalia Piórkowska, Malwina Brożyna, Tomasz Matys, Adam Junka bioRxiv 2025.10.16.682789; doi: <https://doi.org/10.1101/2025.10.16.682789>

[3] "*Galleria mellonella* (greater wax moth) larvae as a model for toxicity testing of chemicals." Ignasiak K, Maxwell A. BMC Research Notes. 2017; <https://doi.org/10.1186/s13104-017-2757-8>.

Wieloomiczna analiza mikrobiomu jamy ustnej i profilu metabolicznego w zespołach Alströma i Bardeta–Biedla

Patrycja Mojsak¹, Ewa Zmysłowska-Polakowska², Sandra Chmielewska¹, Krzysztof Sołowiej¹, Tomasz Płoszaj³, Sebastian Skoczylas³, Julia Grzybowska-Adamowicz³, Tomasz Pienkowski¹, Adam Kretowski^{1,4}, Agnieszka Zmysłowska³, Michał Ciborowski^{1,5}

¹ *Laboratorium Metabolomiki i Proteomiki, Centrum Badań Klinicznych, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku, Białystok,*

² *Zakład Endodoncji, Uniwersytet Medyczny w Łodzi,*

³ *Zakład Genetyki Klinicznej, Uniwersytet Medyczny w Łodzi,*

⁴ *Klinika Endokrynologii, Diabetologii i Chorób Wewnętrznych, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku,*

⁵ *Zakład Biochemii Medycznej, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku.*

Zespół Alströma (ALMS) i zespół Bardeta–Biedla (BBS) są rzadkimi ciliopatiami o wielonarządowym przebiegu, którym często towarzyszą otyłość, insulinooporność i cukrzyca typu 2. Ogólnoustrojowe zaburzenia metaboliczne mogą wpływać na mikrobiom jamy ustnej, jednak badania łączące analizę mikrobiomu i metabolomu w tych chorobach są nadal nieliczne.

Próbki śliny i płynu dziąsłowego (GCF) pobrano od pacjentów z genetycznie potwierdzonym ALMS i BBS oraz od osób z otyłością i zdrowych osób stanowiących odpowiednio grupy odniesienia i kontrolne. Profilowanie mikrobiomu przeprowadzono metodą sekwencjonowania ampikonów regionów V3–V4 genu 16S rRNA, natomiast niecelowane profilowanie metabolomiczne wykonano z wykorzystaniem chromatografii gazowej sprzężonej ze spektrometrią mas (GC–MS). Zależności między mikrobiomem a metabolomem oceniano za pomocą korelacji rang Spearmana, a następnie przeprowadzono analizę wieloomiczną z wykorzystaniem Multiple Co-Inertia Analysis (MCIA) oraz nadzorowanej metody DIABLO (mixOmics). Wszystkie analizy statystyczne przeprowadzono w środowisku R (wersja 4.0.0).

Analiza wykazała charakterystyczne wzorce zależności między mikrobiomem a metabolomem w grupie ALMS+BBS. W porównaniu z grupami kontrolnymi w grupie ALMS+BBS stwierdzono zwiększoną względną liczebność bakterii z rodzajów *Prevotella*, *Enterococcus* i *Eikenella* oraz zmniejszoną względną liczebność bakterii z rodzaju *Lactobacillus*. Profilowanie metabolomiczne wykazało zmiany obejmujące metabolity związane z przemianami aminokwasów, kwasów tłuszczowych i węglowodanów. W GCF obserwowano wyraźne zależności między metabolitami a bakteriami należącymi do typów Firmicutes, Proteobacteria i Actinobacteriota, natomiast w ślinie stwierdzono bardziej rozbudowaną sieć zależności. Zależności te były nieobecne lub wyraźnie słabsze w grupach osób z otyłością i osób zdrowych. Analiza MCIA wykazała współzmienność mikrobiomu jamy ustnej oraz profili metabolomicznych śliny i GCF, natomiast analiza DIABLO pozwoliła wyodrębnić zestaw powiązanych cech mikrobiomowych i metabolomicznych charakterystycznych dla grupy ALMS+BBS.

Obserwowane zmiany w profilach metabolomicznych, obejmujące metabolity związane z przemianami aminokwasów, lipidów i węglowodanów, były powiązane ze zmianami w strukturze mikrobiomu jamy ustnej w grupie ALMS+BBS. Analiza wieloomiczna wskazała na współwystępujące zmiany w mikrobiomie jamy ustnej oraz metabolomach śliny i GCF. Wyniki te wskazują na potencjalne powiązania między mikrobiomem jamy ustnej a metabolizmem w ALMS i BBS, jednak wymagają potwierdzenia w większych badaniach podłużnych i funkcjonalnych.



S03 KS05

Krajobraz zmian metabolicznych w sarkopenii: integracyjna analiza badań metabolomicznych

Aleksandra Wojszel^{1,2}, Krzysztof Sołowiej¹, Michał Ciborowski^{1,3}, Zyta Wojszel⁴, Joanna Godzien¹

¹Laboratorium Metabolomiki i Proteomiki, Centrum Badań Klinicznych, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku (UMB); ²Szkoła Doktorska, UMB; ³Zakład Biochemii Lekarskiej, UMB; ⁴Klinika Geriatrii, UMB. joanna.godzien@umb.edu.pl

Sarkopenia jest postępującym zaburzeniem układu mięśniowego związanym z utratą masy i funkcji mięśni, którego rozwój wynika ze złożonych zmian fizjologicznych i metabolicznych. Pomimo rosnącej liczby badań metabolomicznych obraz zaburzeń metabolicznych charakterystycznych dla sarkopenii pozostaje niejednoznaczny, m.in. ze względu na różnice między badanymi populacjami, stosowanymi kryteriami diagnostycznymi oraz wykorzystywanymi platformami analitycznymi. Celem pracy była zintegrowana charakterystyka zmian metabolicznych związanych z sarkopenią na podstawie dostępnych badań przeprowadzonych z wykorzystaniem materiału biologicznego pochodzącego od ludzi.

Do analizy włączono badania porównujące profile metaboliczne osób z sarkopenią oraz osób z grup kontrolnych. Wykluczono prace dotyczące sarkopenii współistniejącej z innymi jednostkami chorobowymi, a także badania oceniające wpływ interwencji, w tym aktywności fizycznej, suplementacji lub diety. Ostatecznie uwzględniono 22 badania wykorzystujące podejście niecelowane oraz 14 badań opartych na analizach celowanych. Z publikacji wyodrębniono wszystkie metabolity istotnie różniące badane grupy, uzyskując początkowo niemal 1000 rekordów. Następnie przeprowadzono szczegółową kurację danych, obejmującą ujednolicenie nazewnictwa, identyfikatorów chemicznych i klasyfikacji metabolitów oraz usunięcie powtarzających się związków.

Po przeprowadzeniu kuracji danych uzyskano ponad 550 unikalnych metabolitów związanych z sarkopenią. Około połowę z nich stanowiły lipidy reprezentowane przede wszystkim przez acyle kwasów tłuszczowych, glicerolipidy, glicerofosfolipidy, sfingolipidy oraz lipidy sterolowe. Pozostałą część stanowiły związki nielipidowe, przede wszystkim aminokwasy i ich pochodne, węglowodany, a także nukleotydy i związki z nimi powiązane. Integracja wyników umożliwiła identyfikację zarówno powtarzalnych, jak i zróżnicowanych populacyjnie zmian metabolicznych towarzyszących sarkopenii. Analizy wykazały również, że obserwowany profil metaboliczny jest związany z charakterystyką badanych populacji, a do istotnych źródeł zróżnicowania należą m.in. wiek, BMI, płeć oraz pochodzenie etniczne populacji.

Uzyskane wyniki pozwoliły na stworzenie zintegrowanego obrazu zmian metabolicznych towarzyszących sarkopenii oraz wskazanie obszarów metabolizmu wymagających dalszych, pogłębionych analiz. Jednocześnie podkreślają znaczenie czynników demograficznych i populacyjnych w interpretacji wyników badań metabolomicznych oraz stanowią podstawę do bardziej ukierunkowanych analiz mechanizmów metabolicznych związanych z rozwojem sarkopenii.



S03 KS06

Zastosowanie podejścia planowania eksperymentów (design of experiments) do optymalizacji oznaczeń ilościowych acylokarnityn za pomocą LC-MS/MS

Renata Wawrzyniak, Julia Jacyna-Gębala, Wiktoria Struck-Lewicka, Michał J. Markuszewski, Danuta Siluk

*Katedra Biofarmacji i Farmakodynamiki;
ul. Gen. J. Hallera 107, 80-416 Gdańsk;
renata.wawrzyniak@gumed.edu.pl*

Acylokarnityny, jako estry powstałe w wyniku sprzęgania kwasów tłuszczowych i L-karnityny, stanowią strukturalnie zróżnicowaną grupę związków chemicznych. Na podstawie struktury chemicznej ugrupowania acylowego, wyróżnia się następujące klasy acylokarnityn: nasycone, nienasycone, nierozgałęzione, rozgałęzione, monokarboksylowe, dikarboksylowe, niehydroksylowane i hydroksylowane. Z biochemicznego punktu widzenia, acylokarnityny pełnią funkcję kluczowych produktów pośrednich w metabolizmie kwasów tłuszczowych. Ich podstawową rolą biologiczną jest transport grup acylowych z cytozolu do macierzy mitochondrialnej, gdzie grupy te są przenoszone na koenzym A (CoA), tworząc acylokoenzym A (acylo-CoA), który bierze udział w β -oksydacji – procesie kluczowym dla aktywności komórkowej i wytwarzania energii. Dlatego też acylokarnityny są ostatnio opisywane jako potencjalne biomarkery różnych stanów patofizjologicznych, takich jak zaburzenia utleniania kwasów tłuszczowych, niewydolność serca, choroby nowotworowe czy schorzenia neurodegeneracyjne. Ze względu na złożony skład matrycy oraz niskie poziomy stężeń, oznaczenia ilościowe acylokarnityn w próbkach biologicznych wciąż stanowią duże wyzwanie analityczne.

Celem badania było zastosowanie podejścia planowania eksperymentów (ang. design of experiments, DoE) w optymalizacji parametrów źródła jonów do oznaczeń ilościowych 19 acylokarnityn za pomocą techniki LC-QqQ/MS (6475 Agilent Technologies, Waldbronn, Niemcy). Optymalizacji poddano następujące parametry źródła jonów wykorzystującego technologię Jet Stream oraz elektrozpylanie: temperatura gazu suszającego, natężenie przepływu gazu suszającego, ciśnienie rozpylacza oraz napięcie na kapilarze, napięcie na dyszy, natężenie przepływu oraz temperatura gazu osłonowego. Ze względu na fakt, że wiele parametrów źródła jonów wzajemnie na siebie oddziałuje oraz możliwość występowania efektów nieliniowych, optymalizację za pomocą DoE, rozpoczęto od metody planowania powierzchni odpowiedzi, z pominięciem planu wstępnej selekcji. W kolejnym etapie wykorzystano plan eksperymentalny Boxa-Behnkena (z sześcioma powtórzeniami w punkcie centralnym), w ramach którego wykonano 62 nastrzyki, uzyskując dane dotyczące intensywności sygnału, które posłużyły do dalszego modelowania.

Na podstawie analizy regresji wielorakiej zbudowano oddzielne modele dla każdej acylokarnityny. Zoptymalizowane parametry jonizacji dla 19 acylokarnityn, przedstawiały się następująco: temperatura gazu suszającego (300 °C), natężenie przepływu gazu suszającego (12 l/min), ciśnienie rozpylacza (50 psi), napięcie na kapilarze (3900 V), natężenie przepływu gazu osłonowego (11 l/min), temperatura gazu osłonowego (400 °C) oraz napięcie na dyszy (150 V).

Zastosowanie podejścia DoE pozwoliło na wyznaczenie optymalnych parametrów źródła jonów w celu uzyskania jak największej intensywności sygnału przy zachowaniu najwyższej powtarzalności analiz, a także na lepsze zrozumienie procesu jonizacji acylokarnityn. Zoptymalizowane parametry jonizacji zostaną wykorzystane do oznaczeń ilościowych 19 acylokarnityn w osoczu pacjentów ze stenozą aortalną oraz tętniczym nadciśnieniem płucnym.

Finasowanie: grant ABM nr 2024/ABM/03/KPO/KPOD.07.07-IW.07-0075/24-00 finansowany w ramach Krajowego Planu Odbudowy i Zwiększania Odporności Komponent D Efektywność, dostępność i jakość systemu ochrony zdrowia Inwestycja D3.1.1 Kompleksowy rozwój badań w zakresie nauk medycznych i nauk o zdrowiu



S03 KS07

Chemometryczna analiza profili lipidomicznych wybranych organów szczepów myszy laboratoryjnych: BALB/c, C57BL/6 oraz CD1

Bogumiła Kupcewicz¹, Joanna Bogusiewicz², Katarzyna Burlikowska², Barbara Bojko²

¹*Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, Collegium Medicum im. Ludwika Rydygiera w Bydgoszczy
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Bydgoszcz*

²*Katedra Farmakodynamiki i Farmakologii Molekularnej, Collegium Medicum im. Ludwika Rydygiera w
Bydgoszczy Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Bydgoszcz*

kupcewicz@cm.umk.pl

Powszechnie zakłada się, że różne szczepy myszy laboratoryjnych – takie jak BALB/c, C57BL/6 czy CD1 – można traktować jako porównywalne modele badawcze. Założenie to zostało jednak niedawno podważone, opublikowana w *Science* [1] analiza genomów kilkuset szczepów mysich wykazała, że niemal połowa z nich wykazuje niezgodności między deklarowaną nazwą szczepu a jego rzeczywistym profilem genetycznym, co może prowadzić do błędnej interpretacji wyników i ograniczać powtarzalność badań. W tym kontekście istotne staje się pytanie, czy różnice między szczepami przekładają się również na profil molekularny poszczególnych narządów – w tym profil lipidomiczny. Odpowiedź na to pytanie ma znaczenie zarówno dla planowania eksperymentów, jak i dla oceny czy zmienność między szczepowa jest porównywalna ze zmiennością między narządami tego samego organizmu.

W eksperymencie wykorzystano próbki czterech narządów (mózg, wątroba, nerki i mięśnie uda) pobranych od 15 dorosłych samców myszy (w wieku 12 tygodni) - po pięć z trzech szczepów: BALB/c, C57BL/6 i CD1. Zwierzęta trzymane w kontrolowanym środowisku: temp. 22 ± 2 °C, 12-godzinny cykl światło-ciemność, wilgotność $55 \pm 10\%$, ze standardową karmą dla myszy i wodą dostępną *ad libitum*. Próbkę do analizy chromatograficznej pobierano techniką mikroekstrakcji do fazy stałej (SPME) a następnie analizowano metodą LC-HRMS z wykorzystaniem ultrawysokosprawnego chromatografu cieczowego sprzężonym ze spektrometrem mas Q-Exactive Focus Orbitrap.

Profile lipidomiczne były następnie poddane wszechstronnej analizie chemometrycznej z wykorzystaniem zarówno metod eksploracyjnych jak analiza składowych głównych (PCA) i analiza skupień, metod dyskryminacyjnych jak PLS-DA, oraz metody wieloparametrowej łączącej w sobie analizę wariancji (ANOVA) z jednoczesną analizą czynnikową, czyli metody ASCA. Zastosowane podejścia chemometryczne pozwoliły na rozdzielenie i porównanie wpływu czynników „szczep” oraz „narząd” w obserwowaną zmienność lipidomiczną. Obliczenia wykonano z wykorzystaniem programów PLS-Toolbox 7.5 i Matlab R2022b.

1. F. Pardo-Manuel de Villena, *Science* **392** (6799), DOI: 10.1126/science.aec3177



S03 KS08

Wyłączenie MARC2 przeprogramowuje metabolizm wątroby i chroni przed ciężkim fenotypem wywołanym dietą wysokotłuszczową

¹Patryk Kuropka, ²Monika Dzielak, ²Kazimiera Pyśniak, ²Katarzyna Unrug-Bielawska, ²Anita Tyl-Bielicka, ²Michał Mikula, ¹Piotr Młynarz

¹Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Wrocław;

²Narodowy Instytut Onkologii im. Marii Skłodowskiej-Curie - Państwowy Instytut Badawczy, Warszawa

patryk.kuropka@pwr.edu.pl

Białka mitochondrialne amidoxime-reducing component 1 i 2 (MARC1 i MARC2) są coraz częściej łączone z regulacją metabolizmu lipidów oraz podatnością na metaboliczną chorobę wątroby. Pomimo rosnącego zainteresowania ich znaczeniem klinicznym, mechanizm, poprzez który wpływają na rozwój stłuszczenia i zapalenia wątroby, pozostaje niejasny[1]. Celem badania było określenie, czy knockout *Mtarc1* lub *Mtarc2* zmienia odpowiedź wątroby na długotrwałe przeciążenie metaboliczne wywołane dietą GAN.

Badaniem objęto samce i samice myszy typu dzikiego oraz myszy MARC1 KO i MARC2 KO, żywione dietą kontrolną lub hepatotoksyczną dietą GAN. Zastosowano zintegrowane podejście obejmujące nieukierunkowaną metabolomikę i lipidomikę LC-MS, spektroskopię NMR, sekwencjonowanie RNA, analizy biochemiczne oraz ocenę histopatologiczną wątroby. W analizach uwzględniono wpływ genotypu, diety i płci oraz interakcje pomiędzy tymi czynnikami.

Dieta GAN wywołała u myszy typu dzikiego silny fenotyp stłuszczeniowej choroby wątroby. Efekt był szczególnie wyraźny u samców. Najbardziej zaskakującym wynikiem była wyjątkowo silna ochrona obserwowana u myszy MARC2 KO. Pomimo ekspozycji na tę samą dietę zwierzęta te wykazywały wyraźnie mniejsze stłuszczenie, ograniczone cechy zapalenia i uszkodzenia hepatocytów oraz ogólnie łagodniejszy obraz histopatologiczny. Knockout *Mtarc1* nie prowadził do porównywalnego efektu ochronnego.

Profilowanie metabolomiczne i lipidomiczne wykazało, że brak MARC2 głęboko zmienia sposób, w jaki wątroba reaguje na nadmiar lipidów. W MARC2 KO obserwowano odmienną organizację lipidomu: zmiany składu klas lipidowych, kwasów żółciowych, długołańcuchowych wielonienasyconych kwasów tłuszczowych oraz kwasów dikarboksyłowych. Dane transkryptomiczne potwierdziły, że ochronny fenotyp MARC2 KO jest związany z osłabieniem patologicznej odpowiedzi wątroby na dietę GAN. W porównaniu z myszami typu dzikiego obserwowano słabszą aktywację szlaków związanych z magazynowaniem lipidów, zapaleniem, stresem komórkowym, przebudową macierzy zewnątrzkomórkowej i progresją uszkodzenia tkanki. Jednocześnie utrzymane zostały programy wspierające adaptację metaboliczną i homeostazę lipidową. Uzyskane wyniki wskazują, że knockout *Mtarc2* chroni wątrobę poprzez ograniczenie uruchomienia maladaptacyjnego programu metabolicznego i transkrypcyjnego prowadzącego do progresji stłuszczenia w kierunku zapalenia i uszkodzenia tkanki. MARC2 może zatem stanowić istotny regulator podatności wątroby na przeciążenie metaboliczne oraz potencjalny cel przyszłych strategii terapeutycznych.

Podziękowanie: Badanie zostało ufundowane przez Narodowe Centrum Nauki (NCN), projekt OPUS: "Rola zaburzeń metabolicznych modulowanych białkiem MTARC2 w raku jelita grubego", grant nr. 2022/45/B/NZ5/01474.

1. S. Rixen, J. Biol. Chem. 2019, 294, 17593–17602



S03 KS09

Dwa kolory terapii: fluorescencyjne nośniki zawierające pochodne kwasu litocholowego do obrazowania i dostarczania leków

D. Szymczuk^{1,2}, K.H. Markiewicz¹, K. Niemirowicz-Laskowska², H. Car², Joanna Wołosiewicz¹, A.Z. Wilczewska¹

¹ Zakład Polimerów i Syntezy Organicznej, Uniwersytet w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok

² Zakład Farmakologii Doświadczalnej, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku, ul. Szpitalna 37, 15-295 Białystok

d.szymczuk@uwb.edu.pl

Nowotwory pozostają jednym z największych wyzwań współczesnej medycyny. Ograniczona selektywność leków przeciwnowotworowych oraz ich działania uboczne powodują rosnące zainteresowanie inteligentnymi systemami dostarczania leków, umożliwiającymi jednoczesną terapię i obrazowanie procesów biologicznych. Szczególnie obiecujące są układy wykorzystujące pochodne związków naturalnych, np.: kwasów żółciowych, które dzięki amfifilowej budowie mogą wpływać na transport przez błony komórkowe i oddziaływania z układami biologicznymi.

W niniejszej pracy przedstawiono nową koncepcję fluorescencyjnych polimerowych nośników leków zawierających pochodne kwasu litocholowego (LCA). Otrzymano serię homopolimerów i kopolimerów rozpuszczalnych lub dyspergowalnych w wodzie, zawierających pochodne LCA zarówno na końcach łańcuchów polimerowych, jak i w segmentach bocznych. Synteza została przeprowadzona metodą kontrolowanej polimeryzacji rodnikowej RAFT, umożliwiającą precyzyjne projektowanie architektury makrocząsteczek.

Wybrane układy zostały kowalencyjnie znakowane fluoroforami, tworząc wielokolorowe nośniki o potencjale teranostycznym. Dokсорubicyna pełniła jednocześnie funkcję leku cytostatycznego i znacznika fluorescencyjnego, natomiast pochodna pirenu została zastosowana jako dodatkowa sonda fluorescencyjna. Takie podejście może umożliwiać jednoczesne śledzenie leku i nośnika w układach biologicznych, co jest istotne w kontekście nowoczesnych technik obrazowania fluorescencyjnego, w tym mikroskopii STED.

Z otrzymanych polimerów wytrącono stabilne nanocząstki, które wykazywały emisję fluorescencji w zakresie światła niebieskiego oraz pomarańczowego. Analiza spektroskopowa potwierdziła możliwość selektywnego wzbudzenia poszczególnych fluoroforów. Wykazano również zdolność badanych układów do enkapsulacji oraz kowalencyjnego przyłączania dokсорubicyny.

Podziękowania:

NCN, grant OPUS nr 2019/35/B/ST5/03391. Analizy wykonano w Centrum Syntezy i Analizy BioNanoTechno Uniwersytetu w Białymstoku. Wyposażenie Centrum zakupiono z funduszy Unii Europejskiej na lata 2007-2013; projekt POPW.01.03.00-20-034/09-00 oraz POPW.01.03.00-20-004/11. Badania biologiczne finansowane przez Uniwersytet Medyczny w Białymstoku (B.SUB.25.215 HC, B.SUB.25.257 KNL).

Literatura:

- [1] Bray F, et al. CA Cancer J Clin. 2024;74(3):229-263.
- [2] D. Szymczuk, et al. Journal of Materials Chemistry B, 2026, 14, 3947-3971
- [3] D. Szymczuk, et al. RSC Advances, 2025, 15, 14246-14258
- [4] A. Wnętrzak, et al. BBA – Biomembranes, 2024, 1866, 184294



S03 KS10

Analogi peptydu E6 jako ligandy domeny PDZ2 białka hDlg.

Michał Jewgiński, Mussa Yussuf Khamis, Rafał Latajka

Afiliacja;

*Katedra Chemii Bioorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, Wybrzeże Wyspiańskiego,
50-370 Wrocław;
e-mail michal.jewginski@pwr.edu.pl*

Interakcje białko-białko (PPI) stanowią kluczowy element wielu szlaków sygnalizacyjnych w komórce, a ich selektywna modulacja otwiera nowe cele terapeutyczne w leczeniu stanów patologicznych, w tym również chorób nowotworowych. Białko hDlg (human Discs Large), będące supresorem nowotworowym, bierze udział w polaryzacji komórek oraz regulacji cyklu komórkowego. Jego domena PDZ2 jest kluczowym miejscem wiązania dla onkoproteiny E6 wirusa brodawczaka ludzkiego (HPV), co prowadzi do ubiquitytacji i degradacji hDlg, sprzyjając transformacji nowotworowej [1]. Projektowanie małocząsteczkowych mimetyków oraz analogów peptydowych zdolnych do zablokowania tej specyficznej powierzchni białkowej stanowi obiecującą strategię przeciwnowotworową [2].

W badaniach skupiamy się na projektowaniu, syntezie oraz ocenie biofizycznej analogów peptydu E6, ukierunkowanych na interakcję z domeną PDZ2 białka hDlg [3].

- [1] Thomas, M., & Banks, L. (1998) *Oncogene*, 17(23), 2943–2954.
- [2] Zhang, Y., Appleton, B. A., Wu, P., Wiesmann, C., & Sidhu, S. S. (2009) *Journal of Molecular Biology*, 393(1), 224–237
- [3] Amacher, J. F., & Madden, D. R. (2015) *Expert Opinion on Therapeutic Targets*, 19(5), 627–638.



S03 KS11

Fenyłowe i ferrocenyłowe pochodne cyklo-(Gly-L-Pro) z modyfikowanym pierścieniem prolinowym: synteza i aktywność biologiczna wobec komórek nowotworowych o fenotypie MDR

Damian Płażuk¹, Andrzej Błauż², Karolina Różga¹, Krzysztof Krawczyk², Maciej Mazurek², Błażej Rychlik²

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

²Uniwersytet Łódzki, Wydział Biologii i Ochrony Środowiska, Centrum Biologii Cyfrowej i Nauk Biomedycznych - Biobank Łódź, ul. Pomorska 141/143, 90-236 Łódź

adres korespondencyjny: Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej, ul. Tamka 12, 91-403 Łódź

e-mail: damian.plazuk@chemia.uni.lodz.pl

Jednym z mechanizmów prowadzących do rozwoju oporności wielolekowej (MDR) jest nadekspresja transporterów ABCB1, ABCC1 i ABCG2, które aktywnie usuwają z komórek różnorodne strukturalnie lekie przeciwnowotworowe, obniżając ich stężenie wewnątrzkomórkowe. Dotychczas opracowane inhibitory tych transporterów nie znalazły zastosowania klinicznego w przełamywaniu MDR, między innymi z powodu niewystarczającej skuteczności, ograniczonej selektywności i działań niepożądanych [1]. Poszukiwane są zatem związki zdolne do jednoczesnego modulowania aktywności kilku transporterów ABC lub wykazujące aktywność cytotoksyczną wobec komórek o fenotypie MDR [2]. Kontynuując nasze wcześniejsze badania nad ferrocenyłowymi pochodnymi cyklo-(Gly-L-Pro) [3], otrzymaliśmy serię pochodnych fenyłowych i ferrocenyłowych, różniących się rodzajem modyfikacji pierścienia prolinowego. Przedstawione zostaną wyniki badań wpływu tych modyfikacji na transport zależny od ABCB1, ABCC1 i ABCG2, uwrażliwianie komórek MDR na działanie cytostatyków oraz cytotoksyczność wobec komórek nowotworowych o zróżnicowanym fenotypie oporności.

Podziękowania: Badania finansowane z projektu NCN (UMO-2018/29/B/ST5/01736)

[1] A. Sajid, H. Rahman, S. V. Ambudkar, „Advances in the Structure, Mechanism and Targeting of Chemoresistance-Linked ABC Transporters”, *Nat. Rev. Cancer* 2023, 23, 762-779

[2] K. Silbermann, J. Li, V. Namasivayam, F. Baltes, G. Bendas, S. M. Stefan, M. Wiese, „Superior Pyrimidine Derivatives as Selective ABCG2 Inhibitors and Broad-Spectrum ABCB1, ABCC1, and ABCG2 Antagonists”, *J. Med. Chem.* 2020, 63, 10412-10432.

[3] A. Błauż, K. Różga, M. Nosek, A. Makal, B. Rychlik, D. Płażuk, „Design, Synthesis, and Biological Evaluation of Ferrocenyl–Cyclo-(Gly-L-Pro) Hybrids Sensitizing Multidrug-Resistant Cancer Cells to Anticancer Agents”, *ACS Med. Chem. Lett.* 2025, 16, 1391-1400.

Cytotoksyczność i internalizacja nanoplastiku do trójwymiarowego modelu łożyska

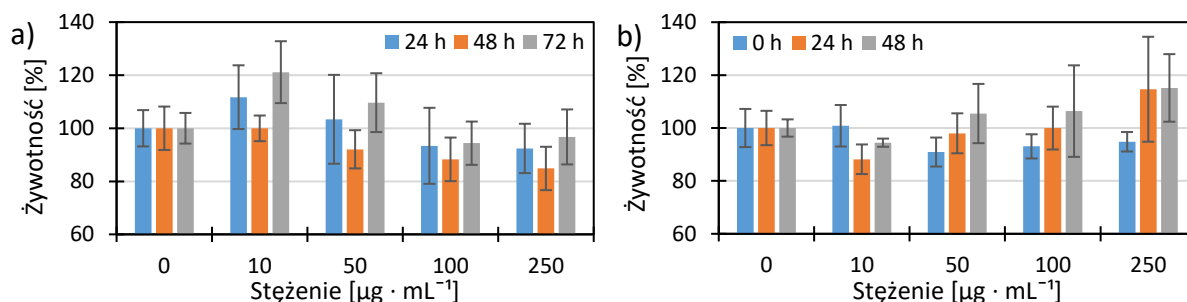
Karolina Jałmużna¹, Patrycja Kobielska¹, Dominika Kozon-Markiewicz¹,
 Anna Kucińska-Chahwan², Michał Chudy¹

1. Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska.
 e-mail: michal.chudy@pw.edu.pl

2. Klinika Położnictwa i Ginekologii, Zakład Genetyki, Instytut Matki i Dziecka (IMiD) w Warszawie

Łożysko stanowi ważny dla utrzymania ciąży organ. Na jego prawidłowe funkcjonowanie mogą mieć wpływ różne czynniki, w tym zanieczyszczenia środowiska. Jednym z szeroko omawianych w ostatnim czasie zanieczyszczeń jest mikroplastik i nanoplastik (NP), który może przenikać do organizmu ciężarnej kobiety drogą skórą, wziewną lub pokarmową. W badaniach nad wpływem różnych czynników na funkcjonowanie organów stosuje się zarówno proste modele w postaci monowarstwy komórek jak i trójwymiarowe modele, np. w postaci agregatów lub sferoidów wielokomórkowych, które lepiej odwzorowują warunki panujące w organizmie *in vivo*. Celem przeprowadzonych badań było określenie cytotoksyczności i internalizacji NP przez trójwymiarowy model łożyska ludzkiego.

Wpływ NP na trójwymiarowy model łożyska ludzkiego, otrzymany z wykorzystaniem komórek raka kosmówki JEG-3, zbadano wykorzystując nanocząstki polistyrenowe znakowane fluorescencyjnie o średnicy 50, 100 i 250 nm. Zbadano wpływ czasu inkubacji oraz stężenia NP. Cytotoksyczność NP określono testem Alamar Blue, a internalizację NP zbadano przy użyciu techniki cytometrii przepływowej oraz mikroskopii. Zbadano efekty długoterwałe po krótkiej inkubacji z NP (24 h).



Rys. 1. A) Żywotności komórek linii JEG-3 inkubowanych z NP o średnicy 50 nm przez 24 h, 48 i 72 h; B) Efekt długoterminowy (24 h i 48 h) po krótkiej (24 h, na wykresie oznaczone jako 0 h) inkubacji z NP o średnicy 50 nm.

NP w zbadanym zakresie stężeń powodował nieznaczny spadek żywotności komórek (do około 84% przy 48 h inkubacji z NP). Zaobserwowane efekty długoterminowe krótkiej inkubacji agregatów z wyższymi stężeniami NP sugerują zdolność komórek raka kosmówki do regeneracji. 24 h po usunięciu zawiesiny NP, żywotność komórek była porównywalna z kontrolą, a 48 h po usunięciu zawiesiny NP wyższa niż kontrola. Internalizacja do komórek budujących agregat została potwierdzona obiema zastosowanymi technikami.

Podziękowanie: Badania finansowane przez Politechnikę Warszawską. Zakup cytometru przepływowego był sfinansowany w ramach projektu Inicjatywa Doskonałości Uczelnia Badawcza, Priorytetowy Obszar Badawczy, Centrum Badawcze Biotechnologia i Inżynieria Biomedyczna – BIOTECHMED-LAB 1 pt." Wielozadaniowe stanowisko do ilościowej i morfologicznej oceny populacji komórek ludzkich (SIMOK)" Projekt Nr. 504/04496/1020/45.



S03 KS13

Chemiczne aspekty metabolizmu glukozy w pediatrycznej ostrej białaczce limfoblastycznej (ALL)

Anna Makowska

*Katedra i Zakład Chemii Medycznej
Gdański Uniwersytet Medyczny
Dębinki 1, 80-211 Gdańsk
anna.makowska@gumed.edu.pl*

W ostatnich latach rośnie zainteresowanie chemicznymi i biochemicznymi mechanizmami regulującymi wykorzystanie glukozy w tkankach rozwijającego się organizmu, ze szczególnym uwzględnieniem szlaków glikolizy, glukoneogenezy oraz modulacji hormonalnej. Badania wskazują, że nieprawidłowości w tych procesach mogą wpływać na stan odżywienia, rozwój metaboliczny oraz podatność na zaburzenia immunologiczne. Szczególną uwagę zwraca się na rolę glukozy w chorobach hematologicznych wieku dziecięcego, takich jak ostra białaczka limfoblastyczna (ALL), gdzie komórki nowotworowe wykazują zmienione profile zużycia glukozy i preferencyjne wykorzystanie szlaków metabolicznych o wysokiej wydajności energetycznej. Zaburzenia metabolizmu glukozy u dzieci stanowią narastający problem kliniczny, dlatego zrozumienie chemicznych podstaw tych procesów może wspierać rozwój nowych strategii żywieniowych, diagnostycznych i terapeutycznych, ukierunkowanych na poprawę rokowania oraz jakości życia pacjentów pediatrycznych.

Celem prezentowanych badań jest pogłębienie wiedzy o biochemicznych aspektach metabolizmu glukozy u dzieci, ze szczególnym uwzględnieniem jego zaburzeń oraz potencjalnych implikacji klinicznych i żywieniowych.



S03 KS14

Nanokapsułki chitozanowe jako nośniki związków neuroprotekcyjnych – ocena aktywności biologicznej w modelach komórkowych

Joanna Odrobińska-Baliś¹, Magdalena Procner^{1,2}, Kinga Kruzel¹, Magdalena Regulska², Monika Leśkiewicz², Dorota Duraczyńska¹, Szczepan Zapotoczny³, Władysław Lasoń², Krzysztof Szczepanowicz¹

¹*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk, ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków, Polska*

²*Instytut Farmakologii im. Jerzego Maja Polskiej Akademii Nauk, ul. Smętna 12, 31-343 Kraków, Polska*
3Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, Polska
magdalena.procner@ikifp.edu.pl

Wraz z postępującym starzeniem się społeczeństwa gwałtownie wzrasta liczba zachorowań na choroby neurodegeneracyjne, takie jak udar mózgu i choroba Alzheimera, co stanowi istotne wyzwanie dla współczesnej medycyny. Jednym z kluczowych mechanizmów prowadzących do uszkodzenia neuronów jest stres oksydacyjny, związany z nadmiernym wytwarzaniem reaktywnych form tlenu (RFT), prowadzący m.in. do nasilenia procesów zapalnych. Obiecującą strategią neuroprotekcijną wydaje się zastosowanie naturalnych lub syntetycznych przeciwutleniaczy, jednak ich skuteczność ogranicza niska biodostępność oraz nieefektywne dostarczanie do zmienionych chorobowo obszarów mózgu. W tym kontekście enkapsulacja związków o właściwościach przeciwutleniających w nanonośnikach może znacząco poprawić ich właściwości farmakokinetyczne i farmakodynamiczne, zwiększając tym samym skuteczność terapii.

Celem niniejszej pracy było opracowanie metody otrzymywania nanonośników chitozanowych przeznaczonych do dostarczania substancji o działaniu neuroprotekcijnym oraz ocena ich właściwości biologicznych, ze szczególnym uwzględnieniem oddziaływania z komórkami oraz zachowania aktywności biologicznej enkapsulowanego związku. Nanocząstki zostały przygotowane z wykorzystaniem procesu emulgowania wspomaganego ultradźwiękami, w oparciu o amfifilowe pochodne chitozanu, które ulegają samoorganizacji w stabilne nanokapsułki z olejowym rdzeniem w środowisku wodnym. W przygotowanych nanonośnikach z powodzeniem enkapsulowano kwas karnozowy - naturalny diterpen występujący w rozmarynie (*Rosmarinus officinalis*), wykazujący silne właściwości przeciwutleniające, przeciwzapalne i neuroprotekcyjne. Otrzymane nanokapsułki o średnicy hydrodynamicznej poniżej 150 nm charakteryzowały się wysoką stabilnością koloidalną oraz wysoką wydajnością enkapsulacji. Ich morfologię scharakteryzowano z wykorzystaniem skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM) oraz mikroskopii konfokalnej, potwierdzając jednorodną strukturę nanokapsulek. Do oceny biokompatybilności *in vitro* wykorzystano linię komórkową ludzkiego nerwiaka zarodkowego SH-SY5Y. Równolegle oceniono potencjał neuroprotekcyny enkapsulowanego kwasu karnozowego w modelu stresu oksydacyjnego indukowanego nadtlaniem wodoru. Badania cytotoksyczności pustych nanocząstek wykazały, że obserwowane efekty były zależne od zastosowanego stężenia, przy czym niższe stężenia można uznać za bezpieczne dla badanych komórek. Dodatkowo wykazano działanie neuroprotekcyjne nanokapsulek zawierających kwas karnozowy w komórkach SH-SY5Y ekspozowanych na działanie H₂O₂ poprzez zwiększenie ich przeżywalności w warunkach stresu oksydacyjnego [1]. Brak cytotoksyczności przy niższych stężeniach względem komórek neuronalnych oraz zachowanie aktywności neuroprotekcyjnej enkapsulowanego związku wskazują, że opracowany nośnik chitozanowy stanowi obiecującą platformę do dostarczania substancji hydrofobowych do ośrodkowego układu nerwowego, zwiększając tym samym ich potencjał terapeutyczny.



S03 KS15

Amplifikacja sygnału kolorymetrycznego w testach przepływu bocznego z wykorzystaniem jako koniugatów anizotropowych nanocząstek złota

Maciej Bagiński, Paulina Billip, Maja Pawlusińska, Karolina Kosińska, Amelia Kostecka, Zuzanna Woźniak, Wiktor Lewandowski

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii ul. Pasteura 1 02-093 Warszawa

mbaginski@chem.uw.edu.pl

Testy immunochromatograficzne typu przepływu bocznego (z ang. LFIA) stanowią jedną z najczęściej stosowanych platform diagnostyki point-of-care ze względu na prostotę wykonania, niski koszt oraz możliwość szybkiego, wizualnego odczytu wyniku. Ich istotnym ograniczeniem pozostaje jednak stosunkowo niska czułość analityczna, wynikająca m.in. z ograniczonego kontrastu optycznego klasycznych sferycznych nanocząstek złota (AuNPs) stosowanych jako reportery.

W pracy zbadano wpływ morfologii plazmonicznych nanocząstek na czułość testu LFIA do oznaczania białka C-reaktywnego (CRP), będącego istotnym biomarkerem ogólnoustrojowego stanu zapalnego. Porównano sześć architektur nanocząstek: sferyczne AuNPs, nanoprzęty, nanotrójki, nanoośmiościany, nanobipiramidy Au pokryte srebrem oraz chiralne nanocząstki złota. W celu możliwie bezpośredniego określenia wpływu geometrii nanocząstek zastosowano jednakową procedurę modyfikacji powierzchni SH-PEG-COOH i koniugacji z przeciwciałami anti-CRP. Przed naniesieniem na podłoże koniugacyjne zawiesiny reporterów znormalizowano do tej samej maksymalnej gęstości optycznej ($OD_{max} = 2,05$) oraz zastosowano identyczną objętość każdego koniugatu.

Badane nanostruktury wykazywały wyraźnie różne właściwości optyczne wynikające z ich geometrii i odpowiedzi plazmonicznej. Najwyższą czułość analityczną uzyskano dla chiralnych nanocząstek Au, dla których granica wykrywalności CRP wyniosła 0,5 ng/mL, co odpowiada niemal 20-krotnej poprawie względem konwencjonalnych sferycznych AuNPs. Wyniki wskazują, że odpowiednie projektowanie morfologii plazmonicznych reporterów może stanowić skuteczną strategię zwiększania czułości wizualnych testów LFIA bez konieczności wprowadzania dodatkowych etapów amplifikacji sygnału.



S03 KS16

Wielofunkcyjne nanonośniki magnetyczne funkcjonalizowane biopolimerami: od syntezy do uwalniania leków indukowanego bodźcami

Paweł Nowak¹, Aleksander Smolarkiewicz-Wyczachowski¹, Miloslav Machacek², Petr Zimcik²,
Anna Kaczmarek-Kedziera¹, Marta Ziegler-Borowska¹

1. Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Chemii, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń, Polska

2. Faculty of Pharmacy in Hradec Kralove, Charles University in Prague, Akademia Heyrovského 1203,
500 05 Hradec Kralove, Czech Republic

e-mail: martaz@umk.pl

Selektywność stanowi kluczowe wyzwanie we współczesnej terapii nowotworów. Konwencjonalne metody leczenia, takie jak radioterapia i chemioterapia, wymagają ograniczenia ich negatywnego wpływu na zdrowe tkanki otaczające zmienione nowotworowo. Jednym z obiecujących rozwiązań jest zastosowanie odpowiednio zaprojektowanych nośników leków, które są już stosowane w praktyce klinicznej. Oprócz zwiększenia selektywności terapii, właściwie skonstruowany nośnik może umożliwiać połączenie kilku efektów terapeutycznych: chemicznego, radiacyjnego oraz termicznego, co może prowadzić do zwiększenia skuteczności leczenia.

W ramach prowadzonych badań zaprojektowano i otrzymano nanocząstki magnetyczne funkcjonalizowane biopolimerami jako nośniki dwóch leków: chlorinu e6, wykorzystywanego w terapii fotodynamicznej (PDT), oraz doksorubicyny, klasycznego leku chemioterapeutycznego. Chlorin e6 związano z nanocząstkami magnetytu pokrywanymi chitozanem, chitozanem modyfikowanym grupami aminowymi oraz hemoglobina bydlęcą. Natomiast jako nośnik doksorubicyny wykorzystano nanocząstki magnetytu pokrywane skrobią modyfikowaną grupami hydrazydowymi (wrażliwymi na zmiany pH) oraz disiarczowymi (wrażliwymi na warunki redoks).

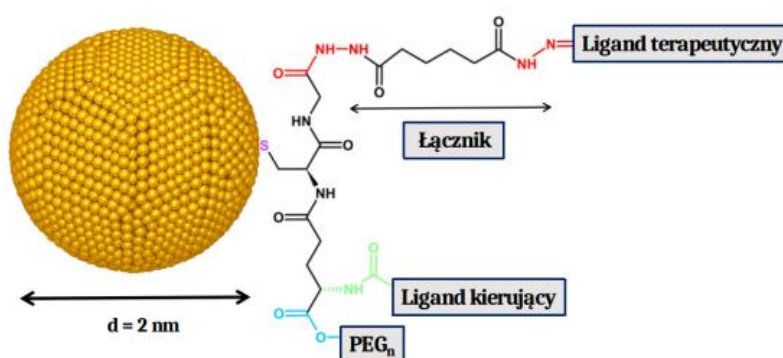
Otrzymane materiały scharakteryzowano pod względem budowy chemicznej, morfologii, stabilności termicznej oraz zdolności do reagowania na określone bodźce. Głównym celem badań było zaprojektowanie nowych materiałów, załadowanie wybranych leków do opracowanych nanonośników, ocena ich uwalniania w obecności odpowiednich bodźców oraz porównanie uzyskanych profili uwalniania z wynikami uzyskanymi w warunkach bez bodźca.

Wieloskładnikowe, wrażliwe na pH systemy nanonośników z organicznie modyfikowanymi cytotoksycznymi prolekami i niskocząsteczkowymi ligandami kierunkowymi do selektywnej aktywacji terapeutycznej w warunkach nowotworowych

Bartosz Smereczyński, Michał Wójcik, dr hab.

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii;
 Pasteura 1, 02-093 Warszawa;
 b.smereczyns@student.uw.edu.pl

Jednym z obiecujących sposobów przezwyciężenia negatywnych efektów ubocznych chemioterapii i przedłużenia życia pacjentów onkologicznych jest zastosowanie nośników opartych o nanocząstki. Nośniki te zostają związane z substancjami leczniczymi, które ulegają selektywnemu uwolnieniu w zmienionych nowotworowo komórkach. Dzięki temu substancje lecznicze statystycznie częściej kumulują się we wnętrzu komórek nowotworowych względem komórek zdrowych. Zapobiega to degradacji prawidłowo funkcjonujących kompartmentów organizmu. Celem pracy było wytworzenie, analiza struktury oraz zdolności terapeutycznych nanocząsteczkowych nośników leków antynowotworowych. Nośniki powstały na bazie małych, sferycznych złotych nanosfer, sfunkcjonalizowanych biokompatybilnymi ligandami pierwotnymi. Ligandy te łączyły się z metalicznym rdzeniem za pomocą trwałych wiązań kowalencyjnych. Do ligandów pierwotnych związane zostały zasadnicze ligandy terapeutyczne (Schemat 1.). Wiązanie to opierało się o układ hydrazonowy, który umożliwił selektywne, hydrolityczne odłączanie ligandów terapeutycznych we wnętrzu zmienionych nowotworowo komórek.



Schemat 1. Ogólna idea projektowanych układów

Autor chciałby złożyć serdeczne podziękowania dr hab. Michałowi Wójcikowi za poświęcony czas i cenne uwagi merytoryczne.



S03 KS18

Synteza i zastosowanie pochodnych z grupy BODIPY od badania interakcji z kwasami nukleinowymi DNA oraz oddziaływań w komórkach w warunkach stresu solnego i oksydacyjnego

Magdalena Rapp¹, Julia Kretkowska¹, Angelika Jaborska¹, Jakub Żubertowski¹, Anna Dembska¹, Mikołaj Pochylski², Tomasz Skrzypczak³, Agnieszka Piasecka⁴, Anna Kasprówicz-Maluśki⁴

¹Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Poznań

²Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Poznań

³ Centrum Zaawansowanych Technologii UAM, Poznań

⁴Wydział Biologii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Poznań

adres korespondencyjny: Wydział Chemii UAM, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań
e-mail: magdrapp@amu.edu.pl

Barwniki z grupy BODIPY, czyli pochodnych BORono-DIPirometenowych stanowią dużą rodzinę syntetycznych barwników organicznych, opartych na rdzeniu 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacenów, w których centralnie położony atom boru połączony jest z dwoma pierścieniami pirołowymi, dzięki czemu posiadają wysoki współczynnik absorpcji światła, stabilność fotochemiczną, oraz znaczną wydajność kwantową fluorescencji.[1,2] Dodatkowo, w zależności od potrzeba istnieje też możliwość zmian reaktywności chemicznej w celu otrzymania pożądanych właściwości. [1,2]

W naszej prezentacji przedstawione zostanie najróżnorodniejsze zastosowanie tych barwników. BODIPY wykorzystano jako sondy fluorescencyjnych, do badania oddziaływań z G-tetrapleksami DNA.[3] Barwniki te zostały także użyte w bioobrazowaniu komórek jako rotory molekularne, w tym w badaniach wpływu stresu osmotycznego na błonach białkowo-lipidowych komórek roślinnych, co zostało dodatkowo potwierdzone dzięki zastosowaniu spektroskopii Brillouina.[4] Obecnie trwają prace nad syntezą i aplikacją związków o właściwościach fotosensybilizujących, gdzie pod wpływem światła o odpowiedniej długości fali generowane są reaktywne formy tlenu (ROS), odpowiedzialne m.in. za stres oksydacyjny w komórkach eukariotycznych. Badania te mogą zostać wykorzystane w diagnostyce i terapii różnych chorób, między innymi w terapii fotodynamicznej (PDT).[5]

Badania finansowane przez Szkołę Nauk Ścisłych UAM PP BNSNS 023 oraz PP BNSNS 028 oraz Program Inicjatywa Doskonałości-Uczelnia Badawcza ID-UB 201/34/UAM/0021; ID-UB 201/34/UAM/0022 oraz ID-UB 215/67/UAM/0048.

Literatura:

- [1] Boens N, Leen V, Dehaen W. Chem. Soc. Rev. 2012, 41, 1130–1172,
- [2] Gurubasavaraj PM, Sajjan VP, Muñoz-Flores BM, Jiménez Pérez VM, Hos-mane NS. Molecules 2022, 27(6), 1877,
- [3] Żubertowski J, Rapp M, Dolicher J, Rubís B, Dembska A. RSC Advances 2025, 15(7), 5220–5231,
- [4] Skrzypczak T, Pochylski M, Rapp M, Wojtaszek P, Kasprówicz-Maluśki A, BMC Plant Biol. 2025, 25, 255,
- [5] Yadav IS, Misra R. J. Mat. Chem. C 2023, 11 (26), 8688–8723.



S03 KS19

Mikrosystemowy model bariery krew–mózg jako narzędzie do badania odwracalnego zwiększania jej przepuszczalności

Weronika Pietrzyk, Areta M. Czerwińska, Kamil Żukowski, Anna D. Grabowska,
Ilona Grabowska-Jadach

*Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska
Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
ilona.jadach@pw.edu.pl*

Bariera krew–mózg stanowi wysoce selektywną strukturę ograniczającą transport wielu substancji terapeutycznych do ośrodkowego układu nerwowego. Dlatego istotne jest opracowywanie zaawansowanych modeli *in vitro*, które umożliwiają kontrolowane badanie mechanizmów regulujących jej przepuszczalność. Celem pracy było opracowanie mikrosystemowego modelu bariery krew–mózg typu organ-on-a-chip, umożliwiającego prowadzenie trójwymiarowej hodowli wielokomórkowej oraz ocenę odwracalnego zwiększenia przepuszczalności bariery pod wpływem impulsów elektrycznych.

W badaniach opracowano model tetra-kultury obejmujący komórki śródbłonna, perycyty, astrocyty oraz komórki mikrogleju, rozmieszczone przestrzennie w obrębie mikrosystemu z kanałem naczyniowym i częścią hydrożelową. Przygotowanie modelu obejmowało procedurę wysiewu komórek, optymalizację warunków prowadzenia hodowli oraz ocenę integralności i funkcjonalności bariery. Przed zastosowaniem impulsów elektrycznych w modelu 3D przeprowadzono optymalizację parametrów elektroporacji w układzie 2D, stosując impulsy prostokątne o częstotliwości 2 Hz. Testowano warianty obejmujące 20 lub 30 impulsów, czas trwania impulsu 50 lub 100 μ s oraz natężenie pola elektrycznego w zakresie 200–1000 V/cm. Na podstawie uzyskanych wyników do badań w mikrosystemie wybrano warunki 30 impulsów o czasie trwania 100 μ s i natężeniu pola 1000 V/cm, które zapewniały efektywną permeabilizację przy zachowaniu żywotności komórek powyżej 90%.

Przepuszczalność modelu oceniano z wykorzystaniem FITC-dekstranu o masie 70 kDa, natomiast żywotność komórek analizowano na podstawie barwienia kalceiną-AM i jodkiem propidyny. Po zastosowaniu impulsów elektrycznych zaobserwowano przejściowy wzrost przepuszczalności bariery. Po 24 godzinach od stymulacji nie stwierdzono już istotnych różnic względem kontroli, co wskazuje na częściowe odtworzenie właściwości barierowych modelu. Jednocześnie analiza żywotności potwierdziła, że zastosowane warunki stymulacji nie prowadziły do istotnego uszkodzenia komórek.

Opracowany mikrosystemowy model bariery krew–mózg może stanowić użyteczne narzędzie do badania kontrolowanej i odwracalnej modulacji przepuszczalności BBB. Jego potencjalne zastosowanie obejmuje ocenę strategii zwiększających transport substancji aktywnych do mózgu, w tym badania nad dostarczaniem leków, nanonośników oraz pęcherzyków zewnątrzkomórkowych.



S03 KS20

Od odpadu do cennego surowca: wykorzystanie oleju z fusów kawowych jako substrat w biosyntezie polihydroksyalkanianów

Maksymilian Kukuc^{1,2}, Anna Iuliano¹, Monika Słomka², Paula Bardadyn², Andrzej Plichta¹

¹Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii i Technologii Polimerów

ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa, maksymilian.kukuc.dokt@pw.edu.pl

²EcoBean Sp. z o.o. ul. Koszykowa 75, 00-662 Warszawa, m.kukuc@ecobean.pl

Kawa jest jednym z najpopularniejszych napojów na świecie, a w Europie codziennie powstaje 9000 ton zużytych fusów kawowych (SCG). Produkcja 1 kg kawy generuje 17 kg CO₂, co czyni SCG wyzwaniem środowiskowym, ale jednocześnie potencjalnym surowcem do recyklingu. Recykling SCG umożliwia ponowne wykorzystanie emisji CO₂, wspierając dekarbonizację w przemyśle kawowym i chemicznym.

Olej kawowy, stanowiący 15–30% masy SCG, jest bogaty w kwasy tłuszczowe i dotychczas był wykorzystywany głównie do produkcji biodiesla. Jednak ze względu na jego wysoką wartość, wykorzystanie oleju kawowego wyłącznie do spalania jest nieefektywne. Niniejsze badanie przedstawia nowe zastosowanie: wykorzystanie oleju z SCG jako surowca do produkcji materiałów polimerowych.

Tłuszcze zawarte w oleju kawowym stanowią źródło węgla dla wzrostu mikroorganizmów. W warunkach ograniczonej dostępności azotu i fosforu oraz nadmiaru węgla, niektóre bakterie syntetyzują poliestry z rodziny polihydroksyalkanianów (PHA), które pełnią ich funkcję materiału zapasowego. PHA są atrakcyjne do zastosowań biomedycznych i opakowaniowych ze względu na ich biokompatybilność i biodegradowalność.

W pracy zbadano mikrobiologiczną syntezę polihydroksymaślanu (PHB) o wysokiej masie molowej z wykorzystaniem bakterii *Cupriavidus necator*. Bakterie hodowano w pożywce mineralnej z olejem kawowym jako źródło węgla. Zawartość PHB w biomasie oznaczano metodą chromatografii gazowej, a strukturę polimeru potwierdzono za pomocą spektroskopii ¹H NMR. Oceniono wpływ trybu prowadzenia hodowli (batch vs. fed-batch) na produkcję PHB, wykazując, że w trybie fed-batch uzyskano o 2,9 g/l wyższe stężenie PHB po 48 godzinach. Zbadano również wpływ stosunku węgla do azotu (C/N) na akumulację PHB, wykazując, że w określonych granicach wyższe stężenia oleju kawowego zwiększały wydajność PHB, podczas gdy stężenie biomasy pozostawało stabilne. Na przykład przy stosunkach C/N równych 10 i 20 w trybie fed-batch stężenie biomasy utrzymywało się na poziomie 16 g/l, natomiast stężenie PHA wzrosło o 0,7 g/l. W optymalnych warunkach uzyskano PHB o masie molowej 550 kg/mol, określonej metodą chromatografii żelowej (GPC).



S03 KS21

Wybrane metaloorganiczne koniugaty paklitakselu: wpływ modyfikacji na właściwości biologiczne

Anna Wieczorek-Błauż,^{a,c} Andrzej Błauż,^b Błażej Rychlik,^b Damian Płażuk,^a

Christian Hartinger,^c

Afiliacja; a) Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Lodz, 12 Tamka St., 91-403 Lodz, Poland, b) Cytometry Lab, Faculty of Biology and Environmental Protection, University of Lodz, 141/143 Pomorska St., 90-236 Lodz, Poland, c) School of Chemical Sciences, University of Auckland, Auckland 1142, New Zealand

adres korespondencyjny; Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Lodz, 12 Tamka St., 91-403 Lodz, Poland

e-mail anna.wieczorek@chemia.uni.lodz.pl

Paklitaksel jest jednym z najważniejszych leków stabilizujących mikrotubule, szeroko stosowanym w leczeniu raka piersi, raka jajnika oraz mięsaka Kaposiego.^[1] Jego zastosowanie kliniczne jest jednak ograniczone przez niekorzystne właściwości fizykochemiczne, podatność na procesy metaboliczne oraz rozwój oporności wielolekowej (ang. multidrug resistance, MDR).^[2] Do głównych mechanizmów oporności wielolekowej związanych ze stosowaniem leków oddziałujących na mikrotubule należą m.in., zaburzenia ekspresji izotypów β -tubuliny oraz nadekspresja transporterów z rodziny ABC, spośród których kluczową rolę w rozwoju oporności na paklitaksel odgrywa transporter ABCB1.^[3] Dlatego poszukiwanie nowych strategii pozwalających ograniczyć wady terapii paklitakselem pozostaje istotnym wyzwaniem. Jednym z obiecujących kierunków jest projektowanie nowych pochodnych tego leku o zmodyfikowanych właściwościach biologicznych i farmakologicznych.

Kontynuując nasze badania nad pochodnymi paklitakselu,^[4,5] przedstawimy serię metaloorganicznych analogów paklitakselu oraz omówimy wpływ modyfikacji podstawnikiem metaloorganicznym na ich właściwości biologiczne.

Staż naukowy na realizację badań został sfinansowany przez Narodową Agencję Wymiany Akademickiej (NAWA) w ramach Programu Bekker (PPN/BEK/2018/1/00492)

Literatura

- [1] Rooseboom, M., Commandeur, J. N. M., Vermeulen N. P. E., *Pharmacol. Rev.*, 2004, 56, 53.
- [2]. Orr, G. A., Verdier-Pinard, P., McDaid, H., Horwitz, S. B., *Oncogene*, 2003, 22, 7280-7295.
- [3] Shuai, W., Wang, G., Zhang, Y., Bu, F., Zhang, S., Miller, D. D., Li, W., Ouyang, L., Wang, Y., *J. Med. Chem.*, 2021, 64, 7963-7990.
- [4] Wieczorek, A., Błauż, A., Żal, A., Arabshahi, H. J., Reynisson, J., Hartinger, C. G., Rychlik, B., Płażuk, D., *Eur. J. Chem.*, 2016, 22, 11413-11421.
- [5] Ciszewski WM, Kowalczyk K, Błauż A, Ciesielski W, Hogendorf P, Smolarz B, Wagner W, Wieczorek-Błauż A, Rychlik BM, Romanowicz H, Durczyński A, Sobierajska K, Płażuk D. *J Med Chem.*, 2025, 68, 19062-19075.



S03 KS22

Repozycjonowanie glimepirydu w terapii skojarzonej z doksorubicyną

Mateusz D. Tomczyk¹, Daria Gendosz de Carrillo^{2,3}, Adam Piecuch², Ewa Gawełek², Marlena Golec⁴, Gabriela Kramer-Marek⁴, Horacio Pérez-Sánchez⁵ i Tomasz Cichoń⁶

¹Katedra Chemii Organicznej, Bioorganicznej i Biotechnologii, Politechnika Śląska, Gliwice

²Katedra i Zakład Fizjologii, Śląski Uniwersytet Medyczny w Katowicach

³Katedra i Zakład Histologii i Patologii Komórki, Śląski Uniwersytet Medyczny w Katowicach

⁴Zakład Radiofarmacji i Obrazowania Przedklinicznego PET, NIO-PIB, Gliwice

⁵Grupa BIO-HPC, Universidad Católica de Murcia (UCAM), Murcia, Hiszpania

⁶Centrum Badań Translacyjnych i Biologii Molekularnej Nowotworów, NIO-PIB, Gliwice

mdtomczyk@polsl.pl

Repozycjonowanie leków stanowi obiecującą i efektywną strategię zwiększania skuteczności chemioterapii przy wykorzystaniu związków o dobrze poznanym profilu farmakologicznym. W naszych badaniach oceniono możliwość zastosowania glimepirydu (GLIM), leku z grupy pochodnych sulfonilomocznika stosowanego w cukrzycy typu 2, jako chemosensytyzatora doksorubicyny (DOX). Screening dostępnych klinicznie pochodnych sulfonilomocznika wykazał szczególnie silną synergię GLIM z DOX. W komórkach raka piersi MCF-7 zastosowanie 45,1 μ M GLIM i 0,12 μ M DOX powodowało około 4,4-krotne zwiększenie cytotoksyczności w porównaniu z samą DOX, a wartość współczynnika kombinacji ($CI \approx 0,11$) potwierdzała silny charakter synergii. Efektowi temu towarzyszyło zwiększenie wewnątrzkomórkowej akumulacji DOX, co wskazuje na możliwy udział modulacji transporterów błonowych z rodziny ABC. Skuteczność kombinacji potwierdzono następnie *in vivo* w modelu raka piersi 4T1 u myszy BALB/c. Dodatkowo wykazano, że wielkość efektu GLIM zależy od formulacji i dawki DOX. Przy dawce 5 mg/kg liposomalna formulacja DOX (Dox-NP) zmniejszała objętość guza w 22. dniu o 70,9% względem kontroli, natomiast połączenie GLIM (4 mg/kg) z Dox-NP powodowało redukcję o 76,6%, odpowiadającą dodatkowej poprawie o 19,4% względem samego Dox-NP. Wyniki wskazują, że glimepiryd może pełnić rolę modulatora odpowiedzi na doksorubicynę, a optymalizacja formulacji i ekspozycji obu leków stanowi istotny element dalszego rozwoju tej strategii w kierunku opracowania nowej terapii skojarzonej.



Sesja posterowa



S03 PS01

Profil metabolomiczny glejaków ze szczególnym uwzględnieniem przemian tryptofanu w glejakach o różnym statusie mutacji *IDH1/2*

Julia Winnicka¹, Aleksandra Chabowska¹, Weronika Juzyszyn¹, Roksana Twaróg¹, Filip Jarzębski¹, Jacek Furtak^{3,4}, Marek Harat^{3,4}, Barbara Bojko², Joanna Bogusiewicz²

¹ *Studenckie Koło Naukowe Metod Mikroekstrakcyjnych, Katedra Farmakodynamiki i Farmakologii Molekularnej Collegium Medicum w Bydgoszczy, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu;* ² *Katedra Farmakodynamiki i Farmakologii Molekularnej Collegium Medicum w Bydgoszczy, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu;* ³ *Katedra Medycyny Klinicznej, Wydział Medyczny, Politechnika Bydgoska;* ⁴ *Oddział Neurochirurgii, 10. Wojskowy Szpital Kliniczny z Polikliniką w Bydgoszczy*

j.bogusiewicz@cm.umk.pl

Glejaki to nowotwory mózgu wywodzące się z komórek glejowych. Ich diagnostyka bazuje na neuroobrazowaniu oraz badaniach genetycznych i histopatologicznych tkanki guza pobranej śródoperacyjnie lub w trakcie biopsji mózgu. Ocena statusu mutacji enzymu IDH (dehydrogenazy izocytrynianowej) jest ważnym elementem diagnostyki. Glejaki z tą mutacją charakteryzują się mniejszą złośliwością i wyższą przeżywalnością pacjentów. Niemniej rokowania często są niskie stąd konieczność badania nowych możliwości diagnostycznych i terapeutycznych.

Celem niniejszych badań była analiza metabolomiczna glejaków o różnym stopniu złośliwości oraz ocena profilu metabolitów wchodzących w skład szlaku przemian tryptofanu.

Pobranie metabolitów z guzów mózgu zostało przeprowadzone z wykorzystaniem sond mikroekstrakcyjnych (SPME, mikroekstrakcja do fazy stałej), bezpośrednio po wycięciu zmiany nowotworowej. Analiza instrumentalna została przeprowadzona z wykorzystaniem chromatografii cieczowej w odwróconym układzie faz sprzężonej z wysokorozdzielczą spektrometrią mas (LC-HRMS).

Analiza metabolomiczna umożliwiła detekcję szerokiego profilu metabolitów takich jak aminokwasy, acylokarnityny i lipidy. Analiza chemometryczna wykazała zróżnicowanie próbek w zależności od statusu mutacji IDH1/2. Z sukcesem wyselekcjonowano także związki o największym potencjale dyskryminacyjnym. Jednym z analitów o wysokim potencjale różnicującym próbki był tryptofan, którego znaczenie w onkologii wzrasta ze względu na liczne doniesienia o zaburzeniach w szlaku kynureninowym w trakcie kancerogenezy. W związku z tym dane metabolomiczne poddano analizie pod kątem profilu produktów przemian tryptofanu. Poza wspomnianym aminokwasem zidentyfikowano sygnały o wartościach m/z odpowiadających m.in. kwasowi kynureninowemu oraz kwasowi 5-hydroksyindoloocetowemu.

Podsumowując, sondy SPME mogą być skutecznie zastosowane do profilowania metabolomicznego glejaków o różnym statusie mutacji IDH1/2, a także podejścia celowanego opartego na analizie konkretnego zestawu analitów.

Badanie finansowane przez Studenckie Towarzystwo Naukowe Collegium Medicum w Bydgoszczy, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu w ramach minigrantu studenckiego: Opracowanie metody analizy tryptofanu i metabolitów powstających w trakcie jego przemian.

[1] *Cancers (Basel)*. 2022;14(11):2793. doi: 10.3390/cancers14112793



S03 PS02

Kreatynina czy ciężar właściwy? Porównanie metod normalizacji w analizie aminokwasów w moczu

Natalia Drabińska-Fois

*Pracownia Badania Związków Lotnych i Aktywnych Sensorycznie, Katedra Technologii Żywności Pochodzenia Roślinnego, Wydział Nauk o Żywności i Żywieniu, Uniwersytet Przyrodniczy w Poznaniu, Wojska Polskiego 31, 60-624 Poznań
natalia.drabinska@up.poznan.pl*

Normalizacja stężeń metabolitów w moczu stanowi kluczowy etap przygotowania danych w badaniach metabolomicznych, szczególnie w przypadku związków o dużej zmienności osobniczej, takich jak aminokwasy. Najczęściej stosowane podejścia obejmują normalizację do kreatyniny lub do ciężaru właściwego, jednak ich przydatność może zależeć od stanu fizjologicznego badanej populacji. Otyłość oraz dieta ketogeniczna są czynnikami potencjalnie wpływającymi na funkcję nerek, co może modyfikować wiarygodność normalizacji opartej na kreatyninie.

Celem pracy było porównanie dwóch metod normalizacji: do kreatyniny oraz do ciężaru właściwego, w analizie aminokwasów w moczu, z wykorzystaniem danych pochodzących z interwencyjnego badania dietetycznego u kobiet z nadwagą i otyłością.

Analizę przeprowadzono na próbkach moczu z badania interwencyjnego z udziałem 80 kobiet z nadwagą i otyłością typu I, które stosowały redukcyjną dietę ketogeniczną lub dietę standardową, w ramach projektu KETO-MINOX. Profil aminokwasów w moczu oznaczono metodą chromatografii gazowej sprzężonej ze spektrometrią mas po derywatyizacji z chloromrówczanem propylu. Uzyskane dane poddano normalizacji do kreatyniny i ciężaru właściwego moczu oznaczonego przez laboratorium diagnostyczne.

Porównanie wykazało, że różnice między metodami normalizacji były niewielkie i nie wpływały istotnie na strukturę danych ani na interpretację zmian aminokwasów w odpowiedzi na interwencję dietetyczną. Mimo że zarówno otyłość, jak i dieta ketogeniczna mogą potencjalnie modulować funkcję nerek, w analizowanej kohorcie nie zaobserwowano efektów, które podważałyby stosowalność normalizacji do kreatyniny.

Badanie zostało sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki (nr projektu 2021/41/B/NZ9/01278).



S03 PS03

Projekt benchmarku do oceny automatycznych metod analizy widm NMR w metabolomice

Natalia Herda, Piotr Młynarz

*Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Wrocław;
nataliaherda2@gmail.com*

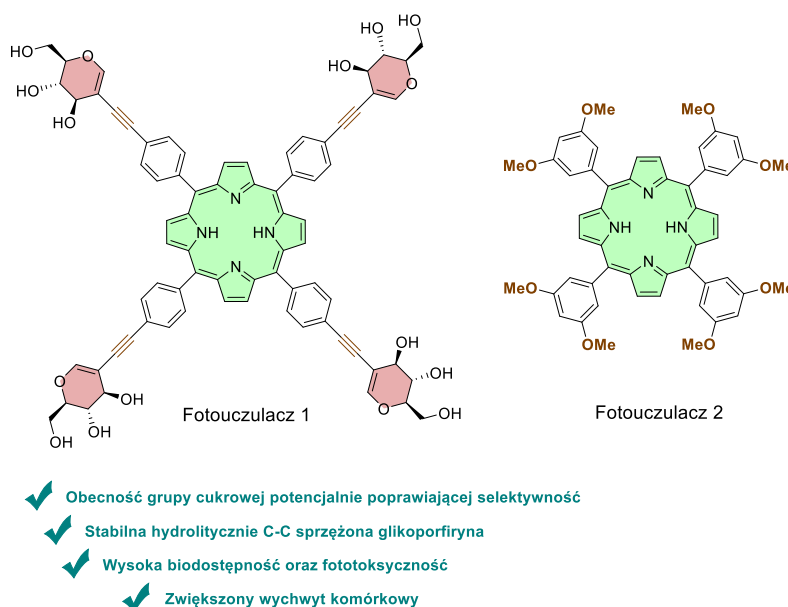
W metabolomice opartej na spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) generowane widma są wykorzystywane do opracowywania i trenowania modeli sztucznej inteligencji (AI). Eksperymentalnie uzyskane dane referencyjne o znanym składzie i kontrolowanej złożoności widmowej mogą stanowić podstawę do oceny metod automatycznej analizy widm. Celem niniejszej pracy było opracowanie eksperymentalnego benchmarku ^1H NMR przeznaczonego do testowania automatycznych metod przetwarzania widm oraz zademonstrowanie jego zastosowania na przykładzie korekcji fazy, jednego z etapów analizy widm. Benchmark obejmuje 82 widma zarejestrowane na spektrometrze 600 MHz. Zawiera próbki pojedynczych metabolitów, wybrane mieszaniny dwuskładnikowe, trójskładnikowe oraz biologicznie motywowane mieszaniny od pięciu do siedmiu metabolitów. Mieszaniny trójskładnikowe wybrano na podstawie heurystycznej oceny złożoności nakładania się sygnałów, uwzględniającej zakres nakładania oraz kształt i złożoność multipletów. Biologicznie motywowane mieszaniny przygotowano z wykorzystaniem względnych proporcji stężeń pochodzących z Human Metabolome Database (HMDB). Jako przykładowe zastosowanie benchmarku porównano dwie automatyczne metody korekcji fazy: TopSpin apk oraz DEEP Phaser zaimplementowany w COLMARvista 1D. Po korekcji fazy 44 z 82 widm (53,7%) pozostały globalnie odwrócone o 180° w przypadku TopSpin apk, w porównaniu z 28 z 82 widm (34,1%) w przypadku DEEP Phaser. Różnica była statystycznie istotna (dokładny test McNemara, $p = 3,1 \times 10^{-5}$). W obrębie próbek jedno-, dwu- i trójskładnikowych częstość globalnej inwersji rosła wraz z liczbą metabolitów, jednak zależność ta nie utrzymywała się w mieszaninach biologicznie motywowanych. W przyszłości benchmark może wspierać porównawczą ocenę narzędzi do automatycznego przetwarzania widm NMR oraz dobór metod odpowiednich do budowy zautomatyzowanych pipeline'ów analizy danych metabolomicznych.

Synteza i badanie terapeutycznego potencjału C-C sprzężonych hybryd porfiryново-cukrowych

Dariusz Baran, Hanna Chmielewska, Areta M. Czerwińska, Maciej Malinowski, Ilona Grabowska-Jadach

Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej;
Stanisława Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa;
dariusz.baran.dokt@pw.edu.pl

Fotodynamiczna terapia przeciwnowotworowa (PDT) jest innowacyjną formą leczenia wykorzystującą fotouczulacz (PS) oraz światło o odpowiedniej długości fali do selektywnego niszczenia komórek nowotworowych w naświetlanym miejscu. W ramach przeprowadzonych badań wytworzono dwa fotouczulacze oparte o strukturę porfiryны, a następnie przeprowadzono z ich wykorzystaniem szereg badań fizykochemicznych oraz biologicznych, w celu określenia i porównania ich potencjału w zwalczaniu komórek nowotworowych.¹ Stanowiący hybrydę cukru i porfiryны fotouczulacz 1 powinien cechować się znacząco poprawionymi właściwościami względem modelowego fotouczulacza 2, będącego prostą porfiryną (Schemat 1). Przyłączenie fragmentu cukrowego do rdzenia porfiryнового powinno poprawić selektywność otrzymanej hybrydy na skutek tzw. efektu Warburga.² Co więcej, ze względu na obecność wielu grup hydroksylowych, otrzymana glikoporfiryna powinna mieć znacząco poprawioną rozpuszczalność w układach wodnych, co stanowi jedno z głównych wyzwań w PDT.



Schemat 1. Struktury wytworzonych fotouczulaczy, które zostały poddane badaniom biologicznym.

Badania zostały sfinansowane z projektu NCN Sonata 19 (2023/51/D/ST5/00384); Metaloorganiczny mariaż cukrów z porfiryнами. Ku nowym fotouczulaczom.

1. H. Chmielewska, D. Baran, A. M. Czerwińska, B. Godlewski, M. Malinowski, I. Grabowska-Jadach; C-C conjugated carbohydrate-porphyrin hybrid: Its therapeutic potential in photodynamic therapy and cellular uptake studies. *J Photochem Photobiol B*; 2026 Jul; 280:113472.

2. Y. Su, K. Lu, Y. Huang, J. Zhang, X. Sun, J. Peng, Y. Zhou, L. Zhao; Targeting Warburg effect to rescue the suffocated photodynamic therapy: A cancer-specific solution; *Biomaterials*; 2023, Vol. 294, 122017.



S03 PS06

Właściwości fizykochemiczne filmów alginianowych zawierających bakuchiol, przeznaczonych do zastosowań kosmetycznych

Sylvia Grabska-Zielińska¹, Ewa Olewnik-Kruszkowska², Ugo D'Amora³

¹*Zakład Technologii Chemicznej i Fizykochemii Materiałów, Wydział Technologii I Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska im. J.J. Śniadeckich*

²*Katedra Chemii Fizycznej i Fizykochemii Polimerów, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu*

³*Institute of Polymers, Composites and Biomaterials—National Research Council (IPCB-CNR), Neapol, Włochy*
sylvia.grabska-zielinska@pbs.edu.pl

Rosnące zainteresowanie naturalnymi składnikami aktywnymi w produktach kosmetycznych i biomateriałach skórnych stwarza potrzebę opracowywania nowych materiałów nośnikowych o odpowiednich właściwościach użytkowych. Szczególną uwagę zwraca bakuchiol – związek pochodzenia roślinnego wykazujący aktywność przeciwutleniającą oraz korzystny wpływ na kondycję skóry. W połączeniu z biodegradowalnymi polisacharydami może stanowić składnik nowoczesnych materiałów przeznaczonych do zastosowań kosmetycznych.

Celem pracy było opracowanie filmów na bazie alginianu sodu zawierających bakuchiol oraz ocena wpływu dodatku substancji aktywnej na ich właściwości fizykochemiczne i funkcjonalne. Materiały otrzymano metodą odparowania rozpuszczalnika, a następnie poddano kompleksowej charakterystyce.

W ramach badań przeprowadzono analizę właściwości mechanicznych, ocenę przepuszczalności pary wodnej, badania spektroskopowe FTIR-ATR, analizę morfologii powierzchni i przekroju poprzecznego metodą skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), ocenę przezroczystości, parametrów barwy oraz właściwości barierowych względem promieniowania UV. Dodatkowo określono aktywność przeciwutleniającą otrzymanych materiałów. Uzyskane wyniki pozwoliły na ocenę wpływu obecności bakuchiolu na strukturę oraz właściwości użytkowe filmów alginianowych.

Przeprowadzone badania wskazują, że filmy na bazie alginianu sodu z dodatkiem bakuchiolu stanowią obiecującą grupę biodegradowalnych materiałów aktywnych. Połączenie właściwości ochronnych matrycy polisacharydowej z aktywnością biologiczną bakuchiolu stwarza możliwości ich wykorzystania w nowoczesnych formułacjach przeznaczonych do zastosowań kosmetycznych oraz pielęgnacyjnych.



S03 PS07

Czasozależne przemiany form arsenu podczas kiełkowania nasion sosny zwyczajnej (*Pinus sylvestris* L.) – pierwszy etap dendroremediacji

Jagna Kosowska, Zofia Wojciechowska, Marlena Baranowska, Sylwia Budzyńska

Katedra Chemii, Wydział Leśny i Technologii Drewna, Uniwersytet Przyrodniczy w Poznaniu;
ul. Wojska Polskiego 75, 60-625 Poznań;
jagna.kosowska@up.poznan.pl

Dendroremediacja terenów zanieczyszczonych arsenem jest procesem długotrwałym, którego skuteczność zależy nie tylko od zdolności dojrzałych drzew do pobierania i stabilizacji metaloidu, lecz także od możliwości kiełkowania nasion oraz prawidłowego rozwoju siewek w warunkach silnego stresu. Kiełkowanie stanowi pierwszy i szczególnie wrażliwy etap rozwoju rośliny, podczas którego uruchamiane są procesy metaboliczne mogące wpływać na pobieranie, rozmieszczenie oraz przemiany form chemicznych pierwiastków obecnych w podłożu. Poznanie tych procesów ma zatem istotne znaczenie dla oceny możliwości naturalnego odnawiania się drzew na terenach zanieczyszczonych oraz dla wyboru gatunków przydatnych w działaniach remediacyjnych.

Celem badań było określenie czasozależnych zmian całkowitej zawartości oraz zawartości wybranych form arsenu w trakcie kolejnych etapów kiełkowania nasion sosny zwyczajnej (*Pinus sylvestris* L.). Nasiona eksponowano na cztery formy metaloidu różniące się mobilnością i toksycznością: As(III), As(V), kwas monometyloarsenowy (MMA) i kwas dimetyloarsenowy (DMA). Materiał roślinny pobierano w pięciu kolejnych fazach kiełkowania, a następnie oznaczano całkowitą zawartość arsenu oraz udział wybranych jego form chemicznych.

We wszystkich wariantach doświadczenia stwierdzono sukcesywny wzrost zawartości arsenu wraz z postępem kiełkowania. W przypadku ekspozycji na As(III) jego całkowita zawartość zwiększała się z 15,4 mg kg⁻¹ w pierwszej fazie do 58,0 mg kg⁻¹ w drugiej i 99,1 mg kg⁻¹ w trzeciej. Analogiczny kierunek zmian obserwowano po zastosowaniu As(V), dla którego oznaczono odpowiednio 10,0, 28,0 i 73,8 mg kg⁻¹. Największą zawartość arsenu stwierdzono w materiale eksponowanym na DMA – wzrastała ona z 25,2 mg kg⁻¹ do 65,2 mg kg⁻¹, osiągając w ostatniej fazie 115,8 mg kg⁻¹.

Profil oznaczonych form metaloidu nie odzwierciedlał wyłącznie formy arsenu zastosowanej w doświadczeniu. Obecność innych nieorganicznych i organicznych form metaloidu wskazuje, że już podczas kiełkowania mogą zachodzić procesy jego redukcji, utleniania i metylacji. Zmieniające się proporcje poszczególnych form w kolejnych fazach świadczą o dynamicznym charakterze tych przemian i sugerują, że odpowiedź nasion na stres arsenowy rozpoczyna się jeszcze przed pełnym wykształceniem organów siewki.

Uzyskane wyniki wskazują, że kiełkowanie nie jest jedynie etapem biernej akumulacji arsenu, lecz okresem intensywnych przemian decydujących o jego biodostępności i potencjalnej toksyczności. Zdolność nasion do kiełkowania, transformacji form arsenu i ograniczania jego szkodliwego działania może warunkować późniejsze zasiedlanie zanieczyszczonych siedlisk przez drzewa, a tym samym stanowić biologiczny punkt wyjścia procesu dendroremediacji.

Badania sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki (NCN) przyznanych na podstawie umowy nr UMO-2023/51/D/NZ9/00817 w ramach projektu pt. *Dendroremediacja arsenu - czasozależna dynamika akumulacji, transformacji i mechanizmów tolerancji form metaloidu u wybranych gatunków drzew leśnych*.

Ocena wpływu eliminacji TPO (tlenku trimetylobenzoilodifenylofosfiny) na stabilność i właściwości reologiczne produktów do stylizacji paznokci

Dawid Biskup^{1,2}, Anna Rył³, Piotr Owczarz³, Izabela Nowak¹, Marta Marzec^{1,2}

¹ Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej;
Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Polska;

² Eclair Investments Company; Filarecka 7/3, 61-501 Poznań, Polska;

³ Politechnika Łódzka, Wydział Inżynierii Procesowej i Ochrony Środowiska, Katedra Inżynierii Chemicznej i Molekularnej; Wólczańska 213, 93-005 Łódź, Polska
nowakiza@amu.edu.pl

Współczesne produkty do stylizacji paznokci, zwłaszcza systemy światłoutwardzalne UV/LED, są cenione za trwałość, połysk i odporność mechaniczną uzyskiwanych powłok. Jednocześnie coraz większe znaczenie mają aspekty bezpieczeństwa ich stosowania, obejmujące ryzyko alergii kontaktowych związanych z obecnością akrylanów i metakrylanów (HEMA – metakrylanu 2-hydroksyetylu; Di-HEMA TMHDC – dikarbaminianu trimetyloheksylo-di-HEMA) i ich ograniczeń regulacyjnych oraz zakaz stosowania fotoinicjatora – tlenku trimetylobenzoilodifenylofosfiny (TPO) w produktach kosmetycznych na terenie Unii Europejskiej od 1 września 2025 r. [1-3]. W konsekwencji rośnie zainteresowanie formułacjami TPO-free, HEMA-free, a jednocześnie układami o analogicznej stabilności fizykochemicznej i korzystnych właściwościach aplikacyjnych. Celem badania było porównanie właściwości reologicznych oraz stabilnościowych produktów do stylizacji paznokci zawierających TPO oraz formułacji pozbawionych tego składnika. Szczególną uwagę poświęcono ocenie, czy eliminacja TPO wpływa na stabilność układu, podatność na separację faz, migrację pigmentów oraz właściwości reologiczne, w tym lepkość, preparatu. Stabilność próbek (dwóch zawierających oraz dwóch niezawierających TPO) oceniono z wykorzystaniem metody wielokrotnego rozpraszania światła (Turbiscan Lab Expert, Formulacion) po 6 miesiącach przechowywania w temperaturze 45 °C. Uzyskane wartości wskaźnika stabilności (ang. *Turbiscan Stability Index*, TSI) wskazały na zadowalającą stabilność większości badanych układów (TSI≈1,5). Jednocześnie, jedna z próbek TPO-free osiągnęła TSI na poziomie 7,4, co sugeruje większą podatność tej formułacji na destabilizację, zwłaszcza w górnej strefie próbki, w okolicy menisku. Obserwowana niestabilność mogła prawdopodobnie wynikać z niewystarczającej optymalizacji układu formułacyjnego względem nowo zastosowanego fotoinicjatora. Na podstawie analizy wyników rotacyjnych i oscylacyjnych pomiarów reologicznych (Physica MCR 301, Anton Paar) stwierdzono, że wyeliminowanie z formułacji TPO wpływa zarówno na właściwości lepkie jak i lepkość – przy czym dotyczą one głównie zmiany wartości modułów dynamicznych i naprężeń stycznych, a nie charakteru zmian tych właściwości – kształtu przebiegów krzywych doświadczalnych. Dodatkowo charakter obserwowanych zmian (wzrost lub spadek mierzonych wartości) zależy od rodzaju badanej formułacji. Wyniki sugerują, że wybrane układy bez TPO mogą stanowić funkcjonalną alternatywę dla produktów zawierających ten fotoinicjator, jednak wymagają dalszej kontroli składu w celu zapewnienia powtarzalnej stabilności produktów gotowych.

[1] Gatica-Ortega M.E., Pastor-Nieto M.-A., Mercader-García P., Silvestre-Salvador J.-F. Allergic contact dermatitis caused by (meth)acrylates in long-lasting nail polish – are we facing a new epidemic in the beauty industry? *Contact Dermatitis*, **2017**, 77, 360–366.

[2] Rozporządzenie Komisji (UE) 2020/1682 dotyczące stosowania HEMA i Di-HEMA TMHDC w produktach kosmetycznych (12.11.2020).

[3] Rozporządzenie Komisji (UE) 2025/877 dotyczące zakazu stosowania TPO w produktach kosmetycznych (12.05.2025).



S03 PS09

Pochodne chitozanu funkcjonalizowane kwasami boronowymi oraz materiały magnetyczne do rozpoznawania glikoprotein

Kinga Mylkie^{1,2}, Aleksander Smolarkiewicz-Wyczachowski^{1,2}, Anna Ilnicka¹, Marta Ziegler-Borowska^{1,2}, Dorota Chełminiak-Dudkiewicz^{1,2}

¹*Katedra Chemii Biomedycznej i Polimerów, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń, Polska*

²*Instytut Studiów Zaawansowanych, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Wileńska 4, 87-100 Toruń, Polska;
e-mail: kinga.mylkie@umk.pl*

Polimery funkcjonalne zawierające grupy zdolne do selektywnego rozpoznawania cząsteczek znajdują zastosowanie m.in. w adsorpcji, separacji oraz wychwytywaniu biomolekuł. W przypadku takich materiałów samo wprowadzenie aktywnych grup funkcyjnych nie gwarantuje jednak ich efektywnego udziału w procesie rozpoznania. Istotnym czynnikiem może być ich dostępność przestrzenna, zależna m.in. od architektury polimeru oraz sposobu przyłączenia grup funkcyjnych. Szczególnie interesującym przykładem są kwasy boronowe, które mogą odwracalnie oddziaływać z cząsteczkami zawierającymi ugrupowania *cis*-diolowe, w tym sacharydami obecnymi w strukturze glikoprotein.

W niniejszej pracy zbadano wpływ sposobu funkcjonalizacji chitozanu na dostępność grup kwasu fenyloboronowego oraz ich zdolność do rozpoznawania cząsteczek zawierających ugrupowania *cis*-diolowe. Chitozan wykorzystano jako platformę do otrzymania trzech pochodnych różniących się sposobem wprowadzenia grup boronowych i architekturą polimeru. Funkcjonalną dostępność miejsc rozpoznania oceniono za pomocą testu Alizarin Red S (ARS), a następnie odniesiono ją do zdolności wiązania glukozy oraz α -1-kwaśnej glikoproteiny (AGP). Dodatkowo otrzymano nanocząstki magnetytu pokryte funkcjonalizowanymi pochodnymi chitozanu, co pozwoliło połączyć właściwości rozpoznawcze polimeru z możliwością szybkiej separacji materiału za pomocą zewnętrznego pola magnetycznego. Uzyskane wyniki wskazują na istotne różnice w dostępności grup boronowych pomiędzy badanymi materiałami oraz pokazują, że sposób ich wprowadzenia do struktury polimeru może wpływać na późniejsze oddziaływania z małymi cząsteczkami sacharydowymi i glikoproteinami.

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu nr 2025/09/X/ST5/00347



S03 PS10

Glikozylowane porfiryny jako potencjalne fotouczulacze w terapii fotodynamicznej — ocena aktywności biologicznej *in vitro*

Patrycja Feltynowska, Areta Czerwińska, Dariusz Baran, Maciej Malinowski,
Iłona Grabowska-Jadach

*Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska
Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
ilona.jadach@pw.edu.pl*

Terapia fotodynamiczna (PDT) stanowi jedną z obiecujących strategii przeciwnowotworowych, której skuteczność determinowana jest właściwościami zastosowanego fotouczulacza, w tym jego zdolnością do absorpcji promieniowania, generowania reaktywnych form tlenu oraz selektywnego oddziaływania z komórkami nowotworowymi. Szczególnie interesującą grupę związków w tym kontekście stanowią glikozylowane porfiryny, łączące właściwości układu porfiryнового z obecnością fragmentów cukrowych, które mogą wpływać na rozpuszczalność, biodostępność, akumulację komórkową oraz profil aktywności biologicznej.

Celem pracy była ocena wybranych glikozylowanych porfiryń jako potencjalnych fotouczulaczy do zastosowań w terapii fotodynamicznej. W ramach badań otrzymano i scharakteryzowano trzy związki różniące się rodzajem fragmentu cukrowego: ZnTPP-D-Arabinal, ZnTPP-D-Glukal oraz ZnTPP-D-Galaktal. Zróżnicowanie strukturalne badanych glikozylowanych porfiryń umożliwiło analizę wpływu części cukrowej na ich właściwości fizykochemiczne oraz aktywność biologiczną. Związki oceniano pod kątem parametrów istotnych dla efektywności PDT, obejmujących charakterystykę spektroskopową UV–Vis, zdolność do generowania reaktywnych form tlenu oraz wydajność kwantową. Następnie ich aktywność biologiczną analizowano w warunkach *in vitro* z wykorzystaniem czterech linii komórkowych: nowotworowych A375 i A549 oraz prawidłowych MRC-5 i HaCaT. Taki układ doświadczalny umożliwił porównanie odpowiedzi różnych typów komórek na działanie analizowanych związków oraz wstępną ocenę ich potencjału jako fotouczulaczy. Cyto- i fototoksyczność glikozylowanych porfiryń oceniano z wykorzystaniem testu AlamarBlue, w oparciu o pomiar aktywności metabolicznej komórek. Związki analizowano w zakresie stężeń 2,5–100 μM . Po 24-godzinnej inkubacji komórek z badanymi związkami przeprowadzano fotoaktywację światłem o długości fali 565 nm przez 30 minut, a aktywność metaboliczną oceniano po 48 i 72 godzinach od ekspozycji. Dla wszystkich badanych związków porównano odpowiedź komórek w warunkach bez naświetlania oraz po fotoaktywacji. Pozwoliło to rozróżnić cytotoksyczność wynikającą z obecności związku w środowisku komórkowym od fototoksyczności indukowanej światłem. Uzyskane wyniki wskazują na istotny udział mechanizmu zależnego od światła w obserwowanej odpowiedzi biologicznej.

Ponadto oceniono wnikanie porfiryń do komórek z wykorzystaniem cytometrii przepływowej, co umożliwiło analizę zależności pomiędzy strukturą badanych związków, ich akumulacją komórkową oraz efektem biologicznym. Uzupełniającym elementem badań była analiza zmian morfologicznych komórek po procedurze PDT, pozwalająca na jakościową ocenę wpływu badanych fotouczulaczy na komórki.

Uzyskane wyniki wskazują, że badane glikozylowane porfiryny wykazują aktywność fotodynamiczną w warunkach *in vitro*, zależną od struktury związku, jego stężenia oraz czasu inkubacji. Przeprowadzone badania stanowią podstawę do dalszej optymalizacji porfiryń funkcjonalizowanych cukrami jako potencjalnych fotouczulaczy.

Podziękowania

Badania finansowane przez Narodowe Centrum Nauki (2023/51/D/ST5/00384).

Aktywność przeciwbakteryjna polskich miódów odmianowych (spadź jodłowa, lipa, nawłóć) wobec wybranych szczepów bakteryjnych

Anna Pietrasz, Henryk Różański

*Państwowa Akademia Nauk Stosowanych w Krośnie;
 ul. Dmochowskiego 12, 38-400 Krosno;
 e-mail: anna.pietrasz@pans.krosno.pl*

Miód jest naturalnym produktem o udokumentowanym potencjale przeciwbakteryjnym, którego aktywność zależy od pochodzenia botanicznego, generowania nadtlenu wodoru, zawartości związków fenolowych oraz parametrów fizykochemicznych. Celem pracy była ocena aktywności przeciwbakteryjnej czterech polskich miódów odmianowych: miodu spadziowego jodłowego (dwa zbiory: 2023 i 2024), lipowego oraz nawłociowego wobec pięciu szczepów bakteryjnych: *Enterococcus faecalis*, *Escherichia coli*, *Streptococcus viridans* (izolat kliniczny), *Bacillus subtilis* oraz *Pseudomonas aeruginosa*.

Miody scharakteryzowano kompleksowo: analizą pyłkową (melisopalinologiczną wg Louveaux i in., 1978), fizykochemicznie (zawartość wody, pH, przewodność elektryczna, polifenole ogółem metodą Folin–Ciocalteu, liczba diastazowa metodą kolorymetryczną Schadege), kolorymetrycznie (CIE $L^*a^*b^*$ wraz z wyliczonymi parametrami Chroma C^* , kąt odcienia h oraz wskaźnik brązowienia BI), polarymetrycznie (metodą Clergeta w wariancie enzymatycznym z inwertazą: sacharoza i cukry redukujące) oraz chromatograficznie (TLC wobec pięciu wzorców fenolowych). Aktywność oznaczono metodą dyfuzyjno-krażkową w trzech stężeniach (100%, 75%, 50% w/v) w pięciu niezależnych powtórzeniach. Równolegle, w identycznych warunkach, badano miód sztuczny (kontrola cukrowa) dopasowany składem cukrowym i zawartością wody do miódów naturalnych.

Trzy niezależne metody: analiza pyłkowa, przewodność elektryczna i kolorymetria zgodnie potwierdziły deklaracje botaniczne wszystkich czterech miódów. Zawartość polifenoli ogółem wynosiła od 432,10 $\mu\text{g GAE/g}$ (nawłóć) do 806,80 $\mu\text{g GAE/g}$ (spadź jodłowa 2025), a wskaźnik brązowienia BI ściśle korelował z zawartością polifenoli ($r = +0,948$), co wspiera BI jako szybki wskaźnik kolorymetryczny. Liczby diastazowe (22,5–24,5 j. Schadege) znacznie przekraczały minimum Codex/UE (8 jednostek), potwierdzając świeżość miódów. Oba miody spadziowe przekroczyły próg przewodności elektrycznej Codex/UE (0,956 i 0,972 mS/cm wobec $\geq 0,8$ mS/cm). Analiza TLC wykazała obecność kwasu kawowego, ferulowego, chlorogenowego i kumaryny we wszystkich miódach.

Miód nawłociowy, mimo najniższej zawartości polifenoli, wykazał aktywność odporną na rozcieńczanie wobec *Bacillus subtilis* (strefa zahamowania 15,0 mm przy wszystkich trzech stężeniach). Miód sztuczny nie wywołał strefy zahamowania wobec żadnego szczepu przy żadnym stężeniu, co definitywnie wyklucza osmotyczny efekt cukrów jako przyczynę obserwowanej aktywności. Korelacja między zawartością polifenoli a aktywnością przeciwbakteryjną była nieistotna statystycznie, co wskazuje, że sama ilość polifenoli nie tłumaczy profilu aktywności najbardziej prawdopodobnym kierunkiem dalszych badań mechanistycznych są flawonole swoiste dla Solidago.

Słowa kluczowe: miód, aktywność przeciwbakteryjna, metoda dyfuzyjno-krażkowa, miód spadziowy, polifenole, Folin–Ciocalteu, liczba diastazowa, TLC, CIE $L^*a^*b^*$, wskaźnik brązowienia

Literatura

- [1] Bogdanov, S., Ruoff, K., & Persano Oddo, L. (2004). Physico-chemical methods for the characterisation of unifloral honeys: A review. *Apidologie*, 35(Suppl. 1), S4–S17.
- [2] Combarros-Fuertes, P., Fresno, J. M., Estevinho, M. M., Sousa-Pimenta, M., Tornadizo, M. E., & Estevinho, L. M. (2020). Honey: Another alternative in the fight against antibiotic-resistant bacteria? *Antibiotics*, 9(11), 774.
- [3] Louveaux, J., Maurizio, A., & Vorwohl, G. (1978). Methods of melissopalynology. *Bee World*, 59(4), 139–157.
- [4] Singleton, V. L., Orthofer, R., & Lamuela-Raventós, R. M. (1999). Analysis of total phenols and other oxidation substrates and antioxidants by means of Folin–Ciocalteu reagent. *Methods in Enzymology*, 299, 152–178.
- [5] Codex Alimentarius Commission. (2001). *Revised Codex standard for honey (CODEX STAN 12-1981, Rev. 2-2001)*. FAO/WHO.



S03 PS12

Tiosemikarbazonowe inhibitory metalo-beta-laktamaz

Hugo Harasimowicz¹, Julia Kostyło, Lev Solovei¹, Waldemar Goldeman², Michał Jewgiński¹, Rafał Latajka¹

Afiliacja;

1. *Katedra Chemii Bioorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław;*
2. *Katedra Chemii Organicznej i Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław
e-mail michal.jewginski@pwr.edu.pl*

Metallo- β -laktamazy (M β L) to grupa enzymów zależnych od cynku, odpowiedzialnych za lekooporne właściwości bakteryjnej na niemal wszystkie antybiotyki β -laktamowe, w tym penicyliny, cefalosporyny i karbapenemy, z których te ostatnie są lekami ostatniej szansy w leczeniu zakażeń bakteriami wielolekoopornymi [1]. Warianty takie jak New Delhi Metallo- β -laktamaza-1 (NDM-1) i kodowana przez Verona Integron Metallo- β -laktamaza-1 (VIM-1) wyłoniły się jako główne zagrożenia ze względu na ich szerokie profile substratowe i szybkie globalne rozpowszechnienie, włączając w to transfer pomiędzy różnymi rodzajami bakterii [2].

Dobór optymalnej metody hamowania aktywności metalo- β -laktamaz zależy w dużej mierze od właściwości konkretnego enzymu, jak również od złożonych celów terapeutycznych. Pomimo, że odnotowano znaczne postępy przy pracach nad opracowywaniem inhibitorów konkretnych metalo- β -laktamaz to nadal istnieje wiele przeszkód ograniczających ich skuteczne wykorzystanie. Jednym z głównych problemów jest duża różnorodność strukturalna tych enzymów, która utrudnia stworzenie związku o szerokim spektrum działania, zdolnego do efektywnego hamowania różnych typów MBL.[3]

Inhibitory zawierające bor, zwłaszcza bicykliczne boroniany, są uznawane za jedną z najbardziej obiecujących grup związków przeznaczonych do zwalczania zakażeń wywoływanych przez bakterie produkujące metalo- β -laktamazy (MBL). Ich działanie opiera się na imitowaniu stanu przejściowego występującego podczas hydrolizy antybiotyków β -laktamowych, dzięki czemu mogą skutecznie oddziaływać z centrum aktywnym enzymu i blokować jego aktywność. Przykładami tej klasy związków są taniborbaktam [4], czy waborbaktam [5].

W aszych badaniach skupiliśmy się na określeniu aktywności inhibitorowej grupy boronowych pochodnych tiosemikarbazonów. Ponieważ jak pokazały nasze wcześniejsze badania [6-8] zarówno tiosemikarbazony jak i ich boronowe analogi zdolne były hamować aktywność enzymatyczną miedzio-zalznego enzymu – tyrozynazy. Natomiast jak wskazują wcześniejsze doniesienia literaturowe, same ugrupowanie tiosemikarbazonowe, również wykazują zdolności inhibitorowe względem M β L.

1. Nahar et al. (2024), J. Clin. Med., 13, 4199.
2. Shakil et al. (2011), J. Chemother., 23, 263–275.
3. J. L. Kurz, et al (2023), Bioorg. Med. Chem. Lett., 92:129387
4. J. C Hamrick et al. (2020) Antimicrob Agents Chemother. 64(3):e01963-1
5. O. Lomovskaya et al. (2017) Antimicrob Agents Chemother 61:10.1128/aac.01443-17.
6. M Jewgiński et al. (2025) Pharmaceutics 17(10), 1300
7. P. Ledwoń et al (2023) J. Enz. Inh. Med. Chem, 38(1):2193676
8. K. Haldys et al (2020) Bioorg. Chem. 94:103419



S03 PS13

Analiza przemian oksydacyjnych 2-selenourydyny w tRNA z wykorzystaniem techniki UPLC-PDA-ESI-MS

Ewelina Wielgus, Katarzyna Kulik, Anna Maciaszek, Barbara Nawrot

Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, ul. Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź
ewelina.wielgus@cbmm.lodz.pl

Nukleozydy zawierające selen są naturalnie występującymi potranskrypcyjnymi modyfikacjami transferowego RNA (tRNA), które regulują dokładność translacji i komórkową odpowiedź na stres. Wśród nich 2-selenourydyna (Se2U) i jej pochodne - w tym 5-metyloaminometylo-2-selenourydyna (mnm5Se2U), 5-karboksymetyloaminometylo-2-selenourydyna (cmnm5Se2U) oraz 5-aminometylo-2-selenourydyna (nm5Se2U) - należą do rzadkich modyfikacji występujących wyłącznie w pętłach antykodonowych bakteryjnych izoakceptorowych tRNA dla kwasu glutaminowego, glutaminy oraz lizyny.

Pomimo ich znaczenia biologicznego reaktywność oksydacyjna tRNA zawierających Se2U pozostaje słabo poznana. Wcześniejsze badania 2-selenouracylu i 2-selenourydyny ujawniły częściowo odwracalną ścieżkę utleniania obejmującą diselenkowe produkty pośrednie, które w komórkowych warunkach redukujących, np. w obecności glutationu, mogą zostać zredukowane do związków wyjściowych [1-3]. Z kolei nieodwracalne utlenianie prowadzi do produktów o charakterze kwasowym, które ostatecznie rozkładają się do pochodnych uracylu lub urydyny oraz nieorganicznych form selenu. Tożsamość, trwałość i znaczenie biologiczne produktów utleniania Se2U powstających w cząsteczkach RNA pozostają jednak w dużej mierze nieznane. W konsekwencji potencjalna rola tRNA zawierających selen w sygnalizacji stresu oksydacyjnego i adaptacji komórkowej nie została dotąd wyjaśniona.

Aby uzupełnić tę lukę poznawczą, zbadaliśmy reaktywność oksydacyjną 2-selenourydyny wbudowanej w łańcuchy RNA. Eksperymenty utleniania modelowego RNA odtwarzającego pętlę antykodonową ujawniły wyraźne i w dużej mierze nieodwracalne przemiany chemiczne Se2U w obrębie RNA. Do monitorowania przebiegu reakcji i identyfikacji produktów wykorzystano technikę UPLC-PDA-ESI-MS. Analiza wpływu reduktorów komórkowych oraz powstawania adduktów z nukleofilami dostarczyła informacji mechanistycznych o przemianach nukleozydów modyfikowanych selenem w warunkach utleniających. Wyniki te przedstawiają pierwszy szczegółowy model mechanistyczny opisujący odpowiedź tRNA zawierających 2-selenourydynę na stres oksydacyjny [4].

Podziękowanie: Badania zostały sfinansowane z grantu 2025/09/X/ST4/0087 Narodowego Centrum Nauki.

Literatura:

- [1] N.C. Payne, A. Geissler, A. Button, A.R. Sasuclark, A.L. Schroll, E.L. Ruggles, V.N. Gladyshev, R.J. Hondal, *Free Radic Biol Med.* **2017**, 104, 249.
- [2] K. Kulik, K. Sadowska, E. Wielgus, B. Pacholczyk-Sienicka, E. Sochacka, B. Nawrot, *Int. J. Mol. Sci.* **2020**, 21, 5956.
- [3] K. Kulik, K. Sadowska, E. Wielgus, B. Pacholczyk-Sienicka, E. Sochacka, B. Nawrot, *Int. J. Mol. Sci.* **2022**, 23, 7973.
- [4] K. Kulik, E. Wielgus, M. Cocchioni, H. Kovács, É.A. Enyedy, A. Maciaszek, B. Nawrot, *Chem. Eur. J.* **2026**, doi: 10.1002/chem.71130.



S03 PS14

Mechanochemiczna synteza kokryształów i układów koamorficznych apremilastu z wybranymi substancjami o działaniu przeciwbólowym i przeciwzapalnym

K. Trzeciak, R. Dolot, M. K. Dudek, E. Wielgus, S. Kaźmierski, M. J. Potrzebowski

*Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych PAN, Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź
katarzyna.trzeciak@cbmm.lodz.pl*

Apremilast (APR), inhibitor fosfodiesterazy-4 stosowany w leczeniu łuszczycy oraz łuszczykowego zapalenia stawów, charakteryzuje się niską rozpuszczalnością w wodzie, co ogranicza jego biodostępność. Podstawą zaprojektowania binarnych układów lek–lek było założenie, że połączenie apremilastu z wybranymi substancjami o działaniu przeciwbólowym i przeciwzapalnym może zwiększać skuteczność terapeutyczną dzięki synergistycznemu działaniu obu leków. Istotnym celem badań było również określenie, czy forma krystalograficzna substratów wpływa na przebieg procesów mechanochemicznych oraz rodzaj otrzymywanych produktów.

Mechanochemiczne mielenie mieszanin APR z kwasem salicylowym (SA), etenzamidem (ET) i paracetamolem (PA) wykazało, że SA i ET tworzą z apremilastem kokryształy, natomiast z PA powstaje stabilny układ koamorficzny. Otrzymane materiały scharakteryzowano z wykorzystaniem m.in. spektroskopii NMR w ciele stałym, proszkowej dyfrakcji rentgenowskiej oraz analiz termicznych. Wykazano ponadto, że zastosowanie solwatowanej formy E apremilastu umożliwia otrzymywanie kokryształów bez dodatku ciekłego wspomagacza mielenia.

Badania rozpuszczalności wykazały istotny wpływ organizacji fazy stałej na właściwości farmaceutyczne otrzymanych układów.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że mechanochemia stanowi skuteczne narzędzie do projektowania nowych binarnych układów farmaceutycznych o korzystnych właściwościach fizykochemicznych.



S03 PS15

Optymalizacja testów przepływu bocznego do oznaczania antygenów hCG i CRP we krwi w celu poprawy czułości i limitu detekcji względem testów komercyjnych

Paulina Billip, Maja Pawlusińska, Maciej Bagiński, Wiktor Lewandowski

*Zakład Chemii Organicznej i Technologii Chemicznej
Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii
p.billip@student.uw.edu.pl*

Testy przepływu bocznego (LFA) umożliwiają szybkie oznaczanie biomarkerów, jednak ich zastosowanie do analizy krwi jest ograniczane przez efekty matrycowe, w tym wzrost tła, zaburzenia przepływu próbki oraz obniżenie intensywności sygnału analitycznego. Celem pracy była optymalizacja warunków oznaczania antygenów hCG i CRP w próbkach krwi z wykorzystaniem testów LFA opartych na nanocząstkach złota jako znaczniku optycznym.

Sferyczne nanocząstki złota otrzymano metodą Turkevicha, a następnie poddano niekowalencyjnej koniugacji z odpowiednimi przeciwciałami. Stabilizację koniugatów wspomagano przez blokowanie niezajętej powierzchni nanocząstek albuminą surowicy bydlęcej. Zmianę właściwości optycznych układu po koniugacji oceniono metodą spektroskopii UV-Vis; maksimum absorpcji przesunęło się z 521 do 525 nm. Wpływ matrycy biologicznej na odpowiedź testu analizowano dla próbek krwi rozcieńczonych buforem RB zawierającym 1% BSA, 1% Tween oraz 30 mM PBS w stosunkach 1:1, 1:10, 1:100 i 1:1000. Dla oznaczania hCG najkorzystniejszy stosunek intensywności sygnału do tła uzyskano przy rozcieńczeniu krwi 1:100, które ograniczało interferencje pochodzące od składników próbki bez nadmiernego osłabienia sygnału testowego.

Dla wybranych warunków przeprowadzono dwie niezależne serie oznaczeń CRP w zakresie 0-250 ng/ml. Obie serie dawały porównywalne wyniki, wskazując na dobrą powtarzalność odpowiedzi testu. Najniższym stężeniem CRP umożliwiającym wizualne rozróżnienie linii testowej było 10 ng/ml, które przyjęto jako granicę detekcji w badanych warunkach. Wyniki wskazują, że kontrola rozcieńczenia krwi stanowi kluczowy element optymalizacji testów LFA dla próbek złożonych i może istotnie poprawić czytelność oraz powtarzalność uzyskiwanego sygnału. Dalsze badania będą obejmowały opracowanie aplikacji analizującej intensywność zabarwienia linii testowej, co umożliwi ilościowe oznaczanie stężenia badanego antygeny oraz bardziej obiektywną interpretację wyników.



S03 PS16

Synteza multifunkcjonalnych układów do terapii przeciwnowotworowej

Franciszek Kapla

ZAKŁAD CHEMII ORGANICZNEJ I TECHNOLOGII CHEMICZNEJ

Laboratorium Nanomateriałów Organicznych i Biomolekul

Wydział chemii, Uniwersytet Warszawski;

Krakowskie Przedmieście 26/28, 00-927 Warszawa

f.kapla@uw.edu.pl

Nanomateriały stały się w ostatnich latach przedmiotem intensywnych badań w medycynie, otwierając nowe perspektywy w diagnostyce i celowanym leczeniu nowotworów. Szczególne zainteresowanie budzą nanocząstki złota (AuNPs), które dzięki zjawisku powierzchniowego rezonansu plazmonowego (LSPR) efektywnie konwertują energię światła z zakresu bliskiej podczerwieni (NIR) na ciepło. Właściwość ta stanowi podstawę terapii fototermicznej (PTT), małoinwazyjnej metody niszczenia tkanek nowotworowych poprzez kontrolowaną, miejscową hipertermię.

W ramach dotychczasowych badań nad układami operującymi w pierwszym oknie optycznym (NIR-I, 700-900 nm) oceniono ich zachowanie biologiczne *in vitro*, charakteryzując kinetykę internalizacji, subkomórkową dystrybucję nanostruktur oraz cytometrycznie identyfikując szlaki indukowanej śmierci komórkowej. Aby pokonać ograniczenia penetracji tkankowej typowe dla zakresu NIR-I, kluczowym kierunkiem rozwoju staje się drugie okno biologiczne (NIR-II, 1000–1700 nm), które oferuje znacznie głębszy zasięg promieniowania oraz zminimalizowane rozproszenie światła w tkankach.

W tym celu zoptymalizowano syntezę miniaturowych nanoprętów złota (mini-AuNRs) o wymiarach 55x8 nm, precyzyjnie dostrajając ich pasmo LSPR do fali 1064 nm. Otrzymane nanordzenie pokryto mezoporowatą krzemionką $mSiO_2$ o kontrolowanej grubości warstwy, uzyskując stabilny układ o wysokiej pojemności sorpcyjnej do celowanego transportu leków.

Kolejnym, planowanym etapem projektu będzie budowa heterostrukтуры wielowarstwowej poprzez naniesienie powłoki tlenku miedzi(I) (Cu_2O) oraz z dwutlenku manganu (MnO_2). Rozbudowa ta pozwoli wykorzystać specyfikę mikrośrodowiska guza (kwaśne pH, nadekspresję GSH) do jednoczesnej aktywacji kontrastu w obrazowaniu MRI, wywołania kaskady fentonopodobnej oraz indukcji kuproptozy, umożliwiając skuteczne przełamanie oporności wielolekowej (MDR).



S03 PS17

Synthesis and Diversification of Boronic Acid, Diazaborinine, and Thiazole Hydrazone Scaffolds as Tyrosinase Inhibitors

¹Mussa Khamis, ¹Michał Jewgiński, ¹Rafał Latajka*

¹Department of Bioorganic Chemistry, Faculty of Chemistry, Wrocław University of Science and Technology
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Poland
Email: rafal.latajka@pwr.edu.pl

Keywords: Tyrosinase, Boronic acid, Diazaborinine, Thiazole.

Tyrosinase is a key copper enzyme involved in melanin production and is linked to hyperpigmentation and melanoma, making it an important target for inhibitor development [1,2]. Boronic acid, diazaborinine, and thiazole hydrazone scaffolds are of interest in medicinal chemistry due to their ability to interact with metal ions and their structural flexibility for drug design [3-5]. These chemical frameworks offer opportunities for rational design and structural modification to enhance binding affinity and biological activity.

In this study, the MST series hybrid compounds were designed, synthesized, and diversified as potential tyrosinase inhibitors. Molecular docking was used to analyze binding interactions and support structure-activity relationships, while enzymatic assays were performed to evaluate tyrosinase inhibition. Among the synthesized compounds, MST3, MST4, MST5, MST6, MST7, and MST8 were evaluated, with MST3 and MST6 exhibiting stronger tyrosinase inhibitory activity than the reference inhibitor, kojic acid. Their enhanced activity may be attributed to the presence of the 3-phenylboronic acid scaffold, which likely promotes favorable interactions within the tyrosinase active site compared with analogues bearing boronic acid at other positions. In addition, MST3 and MST6 share a hydrazone linkage and a similar overall molecular geometry, which may contribute to their comparable binding modes and inhibitory activity. This work integrates synthetic, computational, and biological approaches to support the development of more potent and selective tyrosinase inhibitors.

The MST series demonstrated the potential of boronic acid-based hybrids as tyrosinase inhibitors. Among the synthesized compounds, MST3 and MST6 showed the strongest inhibitory activity, exceeding that of kojic acid, likely due to their 3-phenylboronic acid scaffold, hydrazone linkage, and similar molecular geometry. Molecular docking supported the enzymatic assay results and the observed structure-activity relationships. Future work will focus on optimizing this scaffold and further evaluating the lead compounds through advanced computational studies and biological assays to develop more potent and selective tyrosinase inhibitors.

References

- [1] Shi, Y.; Chen, Z.; Li, J.; et al. *J. Agric. Food Chem.* (2026), 74, 1478 - 1493.
- [2] Park, Y. J.; Jung, H. J.; Kim, H. J.; et al. *Bioorg. Med. Chem.* (2024), 110, 117832
- [3] Khanam, M. A.; Sutrdhar, R. K.; Nath A.; et al. (2024), 1-15 <https://doi.org/10.32388/8M92BF>
- [4] Michał Jewginski et al., *Pharm.* (2025), 17, 1300
- [5] Wei YYi et.al., *EJMC* 46 (2011) 4330e4335; DOI:10.1016/j.ejmech.2011.07.003.



S03 PS18

Enzymatyczna synteza chloropochodnych amin biogennych znakowanych deuterem

Elżbieta Winnicka, Wojciech Gawlik

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii,
ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa
e-mail: eboroda@chem.uw.edu.pl

Fenylotyloamina (PEA), pochodna etyloaminy, jest produktem reakcji dekarboksylacji L-fenylalaniny (L-Phe). Występuje w śladowych ilościach u ssaków i jest metabolizowana w mitochondriach do fenylacetaldehydu. Występuje w ludzkim mózgu – przypuszcza się, że może pełnić rolę neuroprzekaźnika. PEA pokonuje barierę krew-mózg, a po przedostaniu się do układu nerwowego stymuluje układy dopamergiczny oraz noradrenergiczny, ponadto powoduje uwalnianie β -endorfiny – opioidowego peptydu odpowiedzialnego za uczucie przyjemności. Jest obecna także w wielu produktach spożywczych, szczególnie w czekoladzie. W nadmiernych ilościach amina ta może mieć cytotoksyczny wpływ na komórki [1]. Znakowane izotopami radioaktywnymi i stabilnymi chloropochodne PEA znajdują również zastosowanie w badaniach mechanizmów reakcji katalizowanych przez enzymy.

Opracowano metodę syntezy chloropochodnych PEA oraz ich izotopomerów znakowanych deuterem w pozycji (1R) łańcucha bocznego, która polegała na enzymatycznej dekarboksylacji chloropochodnych L-Phe. Reakcja była katalizowana przez enzym dekarboksylazę L-fenylalaninową (EC 4.1.1.53) wyizolowaną z *Streptococcus faecalis* [2]. Źródłem izotopu wodoru była $^2\text{H}_2\text{O}$.

1. B. del Rio, B. Redruello, M. Fernandez, M. Cruz Martin, V. Ladero, M. A. Alvarez, Food Chemistry, 2020, 331, 127303
2. S. Dragulska, E. Winnicka, M. Kańska, Isot Environ Health Stud, 2014, 50, 2, 269



S03 PS19

Synteza i funkcjonalizacja polimerowych mikronośników stosowanych w hodowlach komórek adherentnych.

Zofia Jaworska, Gabriela Hryciuk, Michał Wójcik
Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii
z.jaworska5@student.uw.edu.pl

Naturalne polisacharydy, takie jak dekstran, tworzą wszechstronną, biokompatybilną klasę polimerów szeroko stosowanych w biomedycznych hydrożelach. [1] Jego hydrofilowość i liczne grupy hydroksylowe umożliwiają otrzymywanie hydrożeli oraz ich funkcjonalizację chemiczną. Połączenie dekstranu z żelatyną pozwala uzyskać mikronośniki sprzyjające adhezji komórek adherentnych i zwiększające dostępną powierzchnię hodowlaną bez proporcjonalnego zwiększania objętości układu.

Celem pracy było otrzymanie sferycznych mikronośników z utlenionego dekstranu i żelatyny (Dex-CHO/żelatyna), ich charakterystyka oraz wstępna ocena przydatności do hodowli komórek adherentnych. Dekstran utleniono nadjodanem sodu (NaIO_4), wprowadzając grupy aldehydowe umożliwiające sieciowanie z udziałem żelatyny. Mikronośniki otrzymano metodą emulsji typu woda w oleju (W/O), a ich wielkość, morfologię i skład analizowano za pomocą mikroskopii optycznej, SEM/EDS oraz ATR-FTIR.

Otrzymano mikronośniki o sferycznym kształcie, stosunkowo gładkiej powierzchni i średniej średnicy $231 \pm 44 \mu\text{m}$ ($n = 90$). Obraz SEM odsłoniętego wnętrza wskazywał na drobnoporowatą strukturę. Widma ATR-FTIR wykazały obecność pasm charakterystycznych dla dekstranu i żelatyny, a wyniki EDS były zgodne z organicznym charakterem matrycy. Po 48 godzinach hodowli unieśmiertelnionych bydlęcych komórek satelitarnych mięśni szkieletowych (iBSC) zaobserwowano ich adhezję i rozprzestrzenianie się na powierzchni mikronośników. Wyniki te wstępnie wskazują na potencjał otrzymanych materiałów jako podłoża do hodowli komórek adherentnych.

Obecnie prowadzone są badania nad inkorporacją nanocząstek Fe_3O_4 umożliwiających manipulowanie mikronośnikami w polu magnetycznym oraz funkcjonalizacją peptydem adhezyjnym z wykorzystaniem linkera PEG, obejmujące również testy komórkowe. Dalsze prace obejmą poprawę stabilności mikronośników, ocenę żywotności i proliferacji komórek oraz potencjalnej cytotoksyczności związanej z obecnością Fe_3O_4 , a także badania retencji i uwalniania białka modelowego BSA.

1. Li H, Li X, Jain P, Peng H, Rahimi K, Singh S, Pich A. Dual-degradable biohybrid microgels by direct cross-linking of Chitosan and dextran using azide–alkyne cycloaddition. *Biomacromolecules*. 2020;21(12):4933-44.



S03 PS20

Synteza i charakterystyka nanocząstek PHA jako potencjalnych biodegradowalnych nanoonośników

Oliwia Metryka¹, Magdalena Procter¹, Rafał Szostecki¹, Maciej Guzik¹, Krzysztof Szczepanowicz¹

¹*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk,
ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków, Polska;
oliwia.metryka@ikifp.edu.pl*

Dynamiczny rozwój nanotechnologii przyczynił się do wdrożenia innowacyjnych rozwiązań wykorzystujących materiały i struktury w skali nanometrycznej w wielu obszarach życia oraz różnych sektorach gospodarki. Szczególnym zagadnieniem wyróżniającym się we współczesnych badaniach jest projektowanie i synteza nanoonośników o unikalnych właściwościach, umożliwiając ich wykorzystanie w zaawansowanych zastosowaniach biomedycznych. Jedną z grup materiałów wykorzystywanych do syntezy nanoonośników są biopolimery z klasy polihydroksyalkanianów (PHA) pochodzenia mikrobiologicznego, charakteryzujące się wysoką biodegradowalnością i biokompatybilnością. Dzięki swoim właściwościom stanowią one obiecującą platformę do projektowania inteligentnych systemów dostarczania leków, umożliwiających poprawę stabilności, biodostępności oraz kontrolowane uwalnianie substancji aktywnych, co czyni je potencjalną alternatywą dla obecnie stosowanych nośników. Pomimo licznych badań wpływ struktury chemicznej PHA na właściwości fizykochemiczne i powierzchniowe nanocząstek, warunkujące ich potencjał terapeutyczny, pozostaje nadal niewystarczająco poznany.

Celem badań było opracowanie metody otrzymywania nanocząstek z wybranych biopolimerów z rodziny PHA z wykorzystaniem nanoemulsyfikacji połączonej z odparowaniem rozpuszczalnika oraz ocena ich potencjału jako nośników związków aktywnych. W badaniach zastosowano trzy komercyjnie dostępne kopolimery: poli(3-hydroksymaślan-ko-3-hydroksyheksanian) (PHBH), poli(3-hydroksymaślan-ko-4-hydroksymaślan) (P34HB) oraz poli(3-hydroksymaślan-ko-3-hydroksywalerynian) (PHBV), a także oczyszczony poli(3-hydroksymaślan) (PHB), otrzymany w procesie biosyntezy bakteryjnej.

Nanocząstki otrzymywano metodą nanoemulsyfikacji z odparowaniem rozpuszczalnika. W pierwszym etapie wytwarzano nanoemulsję, w której fazę rozproszoną stanowił roztwór polimeru w lotnym rozpuszczalniku organicznym. Następnie rozpuszczalnik odparowywano, co prowadziło do utworzenia stabilnej dyspersji nanocząstek. Charakterystykę fizykochemiczną nanocząstek przeprowadzono na podstawie pomiarów średnicy hydrodynamicznej i wskaźnika polidispersyjności metodą dynamicznego rozpraszania światła oraz potencjału zeta. Stabilność dyspersji oceniano poprzez monitorowanie zmian tych parametrów podczas 14-dniowej inkubacji. Przeprowadzono również badania cytotoksyczności z wykorzystaniem linii komórkowych HaCaT (ludzkich uniesmiertnionych keratynocytów) oraz 4T1 (komórek mysiego raka sutka).

Otrzymane nanocząstki polimerowe charakteryzowały się wysoką powtarzalnością rozmiarów. Ich średnica hydrodynamiczna mieściła się w zakresie 200–270 nm, wartości PDI wynosiły 0,01–0,20, natomiast potencjał zeta przyjmował wartości od –12,0 do –3,0 mV. Pomimo stosunkowo niewielkich bezwzględnych wartości potencjału zeta otrzymane dyspersje zachowywały wysoką stabilność podczas 14-dniowego przechowywania. Uzyskane wyniki wskazują, że nanoemulsyfikacja połączona z odparowaniem rozpuszczalnika umożliwia powtarzalne otrzymywanie stabilnych nanocząstek z różnych polimerów z rodziny PHA, które mogą stanowić obiecującą platformę do dalszego projektowania biodegradowalnych nośników substancji aktywnych.

Podziękowanie: Praca ta została sfinansowana ze środków przeznaczonych na badania statutowe IKIFP PAN oraz projektu OPUS 2022/45/B/ST4/01184.



S03 PS21

Różnicujący wpływ kannabidiolu i promieniowania UV na skład i właściwości fizykochemiczne błon fibroblastów pacjentów z łuszczycą i osób zdrowych

Izabela Dobrzyńska¹, Julia Trzeciak¹, Elżbieta Skrzydlewska²

¹*Pracownia Bioanalizy, Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku;
ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok
izadob@uwb.edu.pl*

²*Zakład Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku;
ul. Mickiewicza 2D, 15-222 Białystok*

Łuszczycą jest przewlekłą chorobą autoimmunologiczną, której towarzyszy zaburzona homeostaza redoks. Zarówno ogólnoustrojowy, jak i miejscowy stres oksydacyjny odgrywa kluczową rolę w procesach patofizjologicznych komórek. Warunki prooksydacyjne sprzyjają modyfikacjom podstawowych składników komórki, w tym błon komórkowych, takich jak fosfolipidy, glikolipidy i glikoproteiny, czego konsekwencją są zmiany właściwości fizykochemicznych, w tym elektrycznych.

Celem badań była ocena wpływu kannabidiolu (CBD) na skład i właściwości fizykochemiczne błon fibroblastów pochodzących od osób zdrowych i chorych na łuszczycę, narażonych na promieniowanie UVA i UVB.

Właściwości elektryczne fibroblastów (powierzchniową gęstość ładunku, potencjał zeta) określono za pomocą Zetasizer Nano ZS. Skład fosfolipidowy oznaczono metodą HPLC, a poziom produktu peroksydacji lipidów (MDA) zbadano metodą GC/MSMS, natomiast zawartość kwasu sjałowego zmierzono metodą rezorcynolową. Fibroblasty pochodziły z tkanki skóry pobranej od pacjentów, u których zdiagnozowano łuszczycę oraz od osób zdrowych.

W fibroblastach ze zmianami łuszczycowymi stwierdzono obniżenie poziomu głównych klas fosfolipidów oraz zwiększenie zawartości kwasu sjałowego i MDA, a także wzrost ujemnego ładunku błony komórkowej w porównaniu z fibroblastami osób zdrowych. Ekspozycja na promieniowanie UVA/UVB prowadziła do zwiększenia zawartości fosfolipidów i MDA w obu grupach komórek. Jednocześnie w fibroblastach łuszczycowych po napromienianiu obserwowano obniżenie poziomu kwasu sjałowego oraz zmniejszenie ujemnego ładunku błony komórkowej, podczas gdy w komórkach zdrowych odnotowano efekt przeciwny. Zastosowanie CBD nasilało część zmian indukowanych promieniowaniem, dotyczących zawartości fosfolipidów oraz właściwości elektrycznych błon fibroblastów łuszczycowych, natomiast w komórkach osób zdrowych wykazywało działanie ochronne, ograniczając wpływ promieniowania UV.

Uzyskane wyniki sugerują, że zarówno pod wpływem promieniowania UVA/UVB, jak i CBD, w fibroblastach osób zdrowych, jak i chorych na łuszczycę zachodzą zmiany metaboliczne, sprzyjając modyfikacji składu błony komórkowej. Ponadto CBD może chronić zdrowe komórki skóry przed niekorzystnymi zmianami strukturalnymi i funkcjonalnymi błon komórkowych wywołanymi fototerapią stosowaną w leczeniu łuszczycy.



S03 PS22

Projektowanie i synteza nowych związków typu PROTAC jako potencjalnych degraderów dehydrogenazy dihydrofolianowej

Maciej Majcher¹, Mateusz Kogut², Olga Ciupak¹, Magdalena Datta¹, Mateusz Daśko¹

¹Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska

²Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska

Adres korespondencyjny: Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. Gabriela Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk, Polska, s198576@student.pg.edu.pl

Nowotwory złośliwe stanowią jedną z głównych przyczyn zgonów w XXI wieku. Warty podkreślenia jest fakt, że wiele typów nowotworów nabłonkowych, w tym rak jajnika oraz potrójnie ujemny rak piersi, charakteryzuje się nadekspresją receptora kwasu foliowego α (FOLR1) [1]. Kwas foliowy (FA), a dokładniej jego aktywna biologicznie forma tetrahydrofolian (THF), jest kluczowym kofaktorem w metabolizmie jednowęglowym. Ponadto, bierze on udział w biosyntezie puryn i pirymidyn, a jego niedobór uniemożliwia replikację DNA i w konsekwencji hamuje proliferację komórek nowotworowych [2]. W związku z powyższym enzymy zaangażowane w szlak biotransformacji FA stanowią obiecujący cel molekularny dla terapii przeciwnowotworowych. Jednym z głównych enzymów tego procesu jest dehydrogenaza dihydrofolianowa (DHFR), której znanym inhibitorem jest Metotreksat (MTX). Związek ten wiąże się z miejscem aktywnym DHFR, przez co blokuje biotransformację FA i indukuje apoptozę komórek. Choć MTX jest powszechnie stosowany klinicznie, wykazuje silną nefro- i hepatotoksyczność [3]. Z tego powodu poszukiwanie nowych środków terapeutycznych zdolnych do blokowania biotransformacji FA na drodze nowych mechanizmów wydaje się w pełni uzasadnione. W ostatnich latach otrzymano pierwszą serię związków typu PROTAC (ang. *Proteolysis Targeting Chimera*), dla których celem molekularnym jest DHFR – przykładem takiego związku jest Versotreksat (VSTX) [4]. Związki typu PROTAC to dwufunkcyjne cząsteczki, które zdolne są indukować degradację określonego białka zamiast jego inhibicji.

W niniejszych badaniach podjęto próbę rozwoju nowych degraderów DHFR. W tym celu zastosowano techniki *in silico* do zaprojektowania nowego liganda zdolnego do skutecznego wiązania się z celem molekularnym. Za pomocą algorytmów generatywnych zaprojektowano struktury dla analogów MTX, z których następnie wyselekcjonowano związki możliwe do otrzymania na drodze syntezy chemicznej. Dla wybranych kandydatów oszacowano powinowactwo wiązania do DHFR oraz receptora kwasu foliowego FOLR1 przy pomocy oprogramowania Boltz-2. Uzyskane wyniki porównano z wartościami referencyjnymi dla FA i MTX.

Na podstawie badań *in silico* zaprojektowano struktury nowych związków typu PROTAC składających się z wyselekcjonowanego analogu MTX oraz liganda dla ligazy Cereblon połączonych łańcuchem alifatycznym o różnej długości. W chwili obecnej trwają prace nad syntezą dwóch pochodnych, które zostaną poddane badaniom biologicznym po ich otrzymaniu.

Badania finansowane przez Narodowe Centrum Nauki, grant nr UMO-2024/55/D/NZ5/01828

Literatura:

- [1] Gonzalez, T. et al. (2024) *Internat. J. Mol. Sci.* 25(2), pp.1046–1046.
- [2] Shuvalov, O. et al. (2017) *Oncotarget* 8(14), pp.23955–23977.
- [3] Howard, S.C. et al. (2016) *The Oncologist* 21(12), pp.1471–1482.
- [4] Rana, S. et al. (2024) *Cell Chem. Biol.* 31(2), pp.221–233.e14.



S03 PS23

Biotransformacje kwasu *trans*-cynamonowego, jako prekursora do syntezy fluoropochodnych L-fenyloalaniny

Katarzyna Pałka¹, Zuzanna Misiukiewicz¹, Katarzyna Podsadni²

¹Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa

²Warszawski Uniwersytet Medyczny, Katedra i Zakład Biochemii Wydział Lekarski, ul. Banacha 1, 02-097 Warszawa

kskowera@chem.uw.edu.pl

Kwas *trans*-cynamonowy (tCA), kwas beta-fenyloakrylowy, jest kwasem alifatyczno-aromatycznym. Wykazuje działanie ochronne na miąższ wątroby, jest wymiataczem wolnych rodników. Należy do kwasów fenolowych. W roślinach powstaje z aminokwasu – fenyloalaniny. Stanowi substrat do syntezy kwasu kumarowego, kawowego i innych fenolokwasów. Działa immunostymulująco i słabo przeciwbólowo.

W naszych badaniach kwas *trans* – cynamonowy oraz jego fluoropochodne są stosowane jako prekursorzy w syntezie odpowiednich analogów L-fenyloalaniny (L-Phe). Reakcje te są katalizowane przez enzym – liazę L-fenyloalaninową (PAL), (*Phenylalanine Ammonia-Lyase*), pochodzącą z drożdży *Rhodotorula sp.* Na drodze tej enzymatycznej przemiany otrzymano odpowiednie fluoropochodne L-Phe selektywnie znakowane deuterem w pozycji (3*S*) łańcucha bocznego. Otrzymane związki znakowane deuterem oraz trytem zostaną wykorzystane do badań kinetycznych - wyznaczenie szybkości maksymalnej $V_{\max}$ oraz stałej Michaelisa K_m . Ciekawych informacji na temat mechanizmu działania PAL może dostarczyć także metoda kinetycznych i rozpuszczalnikowych efektów izotopowych. Aby zastosować tę metodę do badania mechanizmu powyższych reakcji, niezbędne są związki selektywnie znakowane izotopami wodoru.

1. G. B. D'Cunha, *Enzyme and Microbial Technology*. 2005, 36, 498-502
2. A. Taldaev, D. I. Pankov, R. P. Terekhov, A. K. Zhevlakova, I. A. Selivanova, *Modification of the Physicochemical Properties of Active Pharmaceutical Ingredients via Lyophilization*, *Pharmaceutics*, Vol. 15(11): 2607, 2023,



S03 PS24

Synteza i charakterystyka ultramałych nanocząstek złota funkcjonalizowanych metotreksatem do pH-wrażliwego uwalniania leku

Ida Borucka, Bartosz Smereczyński, Michał Wójcik

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Zakład Chemii Organicznej i Technologii Chemicznej, Pracownia Syntezy Nanomateriałów Organicznych;

ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa;

im.borucka2@student.uw.edu.pl

Przedmiotem pracy był wieloskładnikowy nanokoniugat oparty na ultramałych nanostrukturach złota, zaprojektowany jako nośnik metotreksatu (MTX) uwalnianego w środowisku kwaśnym. Powierzchnię złota stabilizowano glutationem (GSH), który jednocześnie dostarczał grup funkcyjnych do dalszej modyfikacji. Kwas foliowy (FA) pełnił rolę potencjalnego ligandu kierującego, 3-fluoro-4-hydroksybenzaldehyd (3F4HBA) - łącznika umożliwiającego utworzenie zakładanego, kwasolabilnego wiązania iminowego z MTX, natomiast PEG₇₀₀ wprowadzono w celu zwiększenia stabilności koloidalnej.

Nanostruktury Au-GSH otrzymano przez redukcję HAuCl₄ borowodorkiem sodu w obecności GSH. FA i NH₂-PEG₇₀₀-OMe przyłączano po aktywacji grup karboksylowych układem EDC·HCl/NHS, a 3F4HBA wprowadzono z użyciem EDC·HCl i DMAP; następnie jego grupę aldehydową poddano kondensacji z grupą aminową MTX. Kolejne etapy funkcjonalizacji oceniano metodą FT-IR. Rozmiar rdzeni oznaczono za pomocą TEM, pozorną średnicę hydrodynamiczną finalnego nanokoniugatu - metodą DLS, a ilość MTX w fazie ciekłej po 24 h inkubacji przy pH 4 i 36°C - spektrofotometrycznie przy 292 nm.

Zmiany widm FT-IR rejestrowane na kolejnych etapach funkcjonalizacji obejmowały zmiany pasm układów aromatycznych po przyłączeniu FA, pojawienie się pasm aldehydowych po wprowadzeniu 3F4HBA, zmianę profilu pasm po reakcji z MTX oraz wzrost intensywności pasma C–O–C po PEGylacji. Obserwacje te były zgodne z założoną sekwencją modyfikacji powierzchni, jednak ze względu na nakładanie się pasm nie pozwalały jednoznacznie potwierdzić sposobu ani miejsc przyłączenia ligandów. TEM wykazał rdzenie Au o średnicach 0,5-3,5 nm, z dominantą około 2,0 nm, natomiast DLS wskazał dominującą populację o pozornej średnicy hydrodynamicznej około 5-6 nm. Po inkubacji przy pH 4 oznaczono 41,2 µg MTX na mg nanokoniugatu bez PEG₇₀₀ oraz 48,6 µg/mg dla układu PEGylovanego. Wyniki potwierdzają wykonalność sekwencyjnej funkcjonalizacji ultramałych nanostruktur Au-GSH i wykazują obecność MTX w fazie ciekłej w warunkach kwaśnych. Dalsze badania obejmą ocenę działania nanokoniugatu na komórki ludzkiego kostniakomięsaka U2OS, ze szczególnym uwzględnieniem cytotoksyczności i wychwytu komórkowego.



S03 PS25

Biokataliza z udziałem mikroorganizmów w enancjoselektywnej syntezie związków optycznie czynnych

Renata Kołodziejska¹, Agnieszka Tafelska-Kaczmarek², Filip Dobrak³, Antoni Godlewski³, Julia Kuk³, Magdalena Moritz³, Hanna Pawluk¹, Alina Woźniak¹

¹*Katedra Biologii i Biochemii Medycznej, Wydział Lekarski, Collegium Medicum w Bydgoszczy, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu*

²*Katedra Chemii Organicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu*

³*Studenckie Koło Naukowe Biochemii i Chemii Bioorganicznej, Katedra Biologii i Biochemii Medycznej, Wydział Lekarski, Collegium Medicum w Bydgoszczy, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu; Ul. Dębowa 3; 85-626 Bydgoszcz; renatak@cm.umk.pl*

Pochodne α -hydroksyketonów stanowią ważną grupę związków wykorzystywanych w asymetrycznej syntezie organicznej jako cenne bloki budulcowe bardziej złożonych cząsteczek o aktywności biologicznej i znaczeniu przemysłowym. Optycznie czynne α -hydroksyketony (acyloiny) zawierają dwie reaktywne grupy funkcyjne, hydroksylową i karbonylową, umożliwiające ich selektywną transformację do licznych pochodnych organicznych. Związki te znajdują zastosowanie w syntezie farmaceutyków, ligandów chiralnych, produktów naturalnych oraz innych biologicznie aktywnych cząsteczek.

Szczególne znaczenie mają α -hydroksyketony o konfiguracji (R), będące prekursorami wielu substancji leczniczych, w tym bupropionu, inhibitorów produkcji peptydu β -amyloidu rozwijanych w terapii choroby Alzheimera oraz związków o aktywności przeciwnowotworowej i przeciwgrzybiczej. Ponadto acyloiny występują jako elementy strukturalne naturalnych metabolitów wtórnych, takich jak kurasoiny A i B, co podkreśla ich znaczenie w chemii medycznej.

Istotną grupę α -hydroksyketonów stanowią aryloarylowe pochodne, określane jako benzoiny (2-hydroksy-1,2-difenyloetan-1-on i jego pochodne). Związki te wykazują aktywność biologiczną, m.in. jako inhibitory ureazy, oraz są wartościowymi intermediatami w syntezie heterocykli, dioli, diamin, aminoalkoholi i epoksydów. Ich wszechstronność sprawia, że odgrywają istotną rolę w opracowywaniu nowych metod asymetrycznej syntezy i procesów biokatalitycznych.

W niniejszej pracy przedstawiono badania nad asymetrycznym otrzymywaniem chiralnych benzoin metodą enzymatycznej hydrolizy octanu 2-hydroksy-1,2-difenyloetan-1-onu oraz oceniono wpływ deracemizacji racemicznego 2-hydroksy-1,2-difenyloetan-1-onu na selektywność procesu z zastosowaniem preparatu mikrobiologicznego Blossom Protect™. W celu uzyskania enancjomerycznie wzbogaconych benzoin przeprowadzono reakcje enzymatycznego acetylowania oraz hydrolizy, wykorzystując katalityczne właściwości lipaz do przeprowadzenia kinetycznej rozdzielczości badanych układów. Zastosowanie biokatalizatorów umożliwiło prowadzenie procesów w łagodnych warunkach reakcyjnych, przy jednoczesnym uzyskaniu wysokiej aktywności katalitycznej oraz selektywności enancjomerycznej. Uzyskane wyniki potwierdzają, że biokataliza stanowi efektywne i zgodne z zasadami zielonej chemii narzędzie otrzymywania optycznie czynnych α -hydroksyketonów, będących cennymi intermediatami w syntezie związków o znaczeniu farmaceutycznym i biologicznym.



S03 PS26

Synteza nanocząstek magnetycznych modyfikowanych koniugatami fragmentów EGF z lekiem przeciwnowotworowym. Badanie użyteczności w terapii wykorzystującej termoablację

Beata Kolesińska¹, Sima Alvani Alamdari¹, Justyna Frączyk¹, Katarzyna Wojtera², Łukasz Szymański²

Instytut Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, Instytut Mechatroniki i Systemów Informatycznych, Wydział Elektrotechniki, Elektroniki Informatyki i Automatyki, Politechnika Łódzka

beata.kolesinska@p.lodz.pl

Główną przyczyną zgonów na świecie są choroby nowotworowe, stanowią one drugą najczęstszą przyczynę zgonów (po chorobach układu krążenia). W Polsce odpowiadają one za około 25% wszystkich zgonów. W Polsce rocznie diagnozuje się około 170 tysięcy nowych przypadków, a ponad 100 tysięcy osób przegrywa walkę z chorobą. Wymusza to poszukiwanie nowych leków i efektywnych terapii które znajdą zastosowanie w leczeniu chorób onkologicznych. Połączenie termoablacji z nanotechnologią, a konkretnie z nanocząstkami magnetycznymi, to jeden z najbardziej fascynujących i dynamicznie rozwijających się kierunków we współczesnej onkologii (hipertermia magnetyczna). W zależności od energii, możliwe są dwa podejścia terapeutyczne: łagodna hipertermia (41–45°C) oraz termoablacja magnetyczna (>50°C).

W ramach przeprowadzonych prac badawczych otrzymano i scharakteryzowano hybrydowe materiały magnetyczne przeznaczone do potencjalnych zastosowań w terapii nowotworów. Syntezowane i testowane materiały hybrydowe oparte są na nanocząsteczkach magnetycznych pokrytych chitozanem, które były funkcjonalizowane koniugatami fragmentów EGF oraz cytostatyków alkilujących. Założeniem prac badawczych było połączenie właściwości selektywnego oddziaływania fragmentów EGF z komórkami nowotworowymi, działania przeciwnowotworowego leków alkilujących oraz zdolności nanocząsteczek magnetycznych do generowania ciepła w zmiennym polu elektromagnetycznym. Określono wpływ funkcjonalizacji nanocząsteczek magnetycznych na ich właściwości fizykochemiczne, zdolność do uwalniania substancji aktywnych oraz efektywność nagrzewania w warunkach pola elektromagnetycznego. W ramach wykonanych prac badawczych wykonano: 1) syntezę koniugatów fragmentów EGF z lekami przeciwnowotworowymi z grupy cytostatyków alkilujących, otrzymanie nanocząsteczek magnetycznych Fe₃O₄ pokrytych chitozanem oraz ich funkcjonalizację uzyskanymi koniugatami, charakterystykę otrzymanych nanomateriałów z wykorzystaniem technik analitycznych, takich jak FTIR, DLS, TGA oraz HPLC-MS, 2) badanie profilu uwalniania koniugatów lek–fragment EGF z nanocząsteczek Fe₃O₄@chitosan, 3) ocenę stabilności koniugatów w warunkach nagrzewania w zmiennym polu elektromagnetycznym, badanie zdolności otrzymanych nanocząsteczek magnetycznych do generowania ciepła w polu elektromagnetycznym, ocenę wpływu nagrzewania na proces uwalniania koniugatów z powierzchni nanocząsteczek.

Przeprowadzone badania umożliwiły opracowanie metody otrzymywania modyfikowanych nanocząstek magnetycznych, które w przyszłości mogą być zdolne do działania w terapii skojarzonej – termoablacji i celowanego dostarczania leku. Uzyskane wyniki wskazują na potencjał opracowanych materiałów do dalszych badań nad doskonaleniem nowoczesnych nośników leków.



S03 PS28

Nieinwazyjna diagnostyka endometriozy: ocena wybranych biomarkerów z użyciem biosensorów SPRi

Anna Sankiewicz¹, Piotr Laudański², Ewa Gorodkiewicz¹

¹Pracownia Bioanalizy, Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku, Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok, Polska

²Centrum Leczenia Niepłodności OVI klinika, Polczyńska 31, 01-377 Warszawa, Polska.

ania@uwb.edu.pl

Endometrioza jest przewlekłą chorobą ginekologiczną o złożonej patogenezie, której diagnostyka nadal w dużej mierze opiera się na procedurach inwazyjnych. W związku z tym intensywnie rozwijane są metody nieinwazyjne, w tym nowoczesne technologie biosensorowe, umożliwiające oznaczanie biomarkerów w płynach ustrojowych.

Celem pracy była kompleksowa ocena potencjału diagnostycznego wybranych białek: osteopontyny (OPN), mezoteliny (MSLN), leptyny, katepsyn L i S oraz kadheryny 12 (CDH12) z wykorzystaniem biosensorów opartych na obrazowaniu rezonansu plazmonów powierzchniowych (SPRi).

Badania przeprowadzono na próbkach osocza oraz płynu otrzewnowego pobranych od pacjentek poddawanych laparoskopii z powodu podejrzenia endometriozy. Pacjentki podzielono na grupę badaną i kontrolną na podstawie przeprowadzonej oceny laparoskopowej. Stężenia analizowanych markerów oznaczano z wykorzystaniem biosensorów SPRi, których zastosowanie nie wymaga użycia znaczników. Metoda ta charakteryzuje się wysoką czułością, umożliwia równoległą analizę wielu próbek oraz wymaga jedynie minimalnego przygotowania materiału biologicznego.

Nie wykazano istotnych różnic w stężeniach osteopontyny, leptyny, katepsyn L i S oraz CDH12 pomiędzy grupami badanymi w analizowanych płynach ustrojowych, co nie potwierdza ich użyteczności jako biomarkerów endometriozy [1-4]. W przypadku CDH12 zaobserwowano jedynie zależności związane z wiekiem pacjentek oraz ich statusem rozrodczym, co może wskazywać na jego potencjalne znaczenie w określonych subpopulacjach klinicznych i wymaga dalszych badań⁴. Stwierdzono natomiast istotnie wyższe stężenia mezoteliny (MSLN) w płynie otrzewnowym u pacjentek z endometriozą, szczególnie w jej wczesnych stadiach, bez istotnych różnic w osoczu[5].

Podsumowując, wyniki podkreślają znaczenie technologii SPRi jako czułego narzędzia analitycznego w badaniach biomarkerów endometriozy. Spośród analizowanych białek jedynie mezotelina w płynie otrzewnowym wykazuje potencjał diagnostyczny, szczególnie w kontekście wczesnego wykrywania choroby, a zastosowanie biosensorów SPRi umożliwia czułą i szybką analizę białek w płynach ustrojowych i stanowi obiecujące narzędzie w rozwoju nieinwazyjnej diagnostyki endometriozy.

[1] Zygula A, Kiecka K, Sankiewicz A, Kuzmicki M, i in. Int J Mol Sci. 2024;25(22):11857. doi: 10.3390/ijms252211857.

[2] Zygula A, Sankiewicz A, Sakowicz A, Dobrzyńska E, i in Front Endocrinol (Lausanne). 2024;15:1359182. doi:10.3389/fendo.2024.1359182.

[3] Załęcka J, Zielińska Z, Ołdak Ł, Sakowicz A i in. Adv Med Sci. 2024;69(2):224-230. doi: 10.1016/j.advms.2024.04.004.

[4] Goławski K, Zielińska Z, Wojtyła C, Ołdak Ł i in. Diagnostics (Basel). 2025;15(11):1366. doi: 10.3390/diagnostics15111366

[5] Kiecka K, Zygula A, Sankiewicz A, Kuzmicki M, Laudanski P i in. Adv Med Sci. 2026;71(1):1-8. doi: 10.1016/j.advms.2025.11.002.



S03 PS29

Synteza oraz wstępna ocena cytotoksyczności α -aminobisfosfonianów i ich koniugatów

Dominika Kozicka,^{1,2} Małgorzata Krześniak,³ Anna Kuźnik,^{1,2} Jakub Adamek^{1,2}

¹ Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, Gliwice, ² Politechnika Śląska, Centrum Biotechnologii, Gliwice,

³ Narodowy Instytut Onkologii im. Marii Skłodowskiej-Curie - Państwowy Instytut Badawczy Oddział w Gliwicach, Centrum Badań Translacyjnych i Biologii Molekularnej Nowotworów;
e-mail: dominika.kozicka@polsl.pl

Bisfosfoniany (BP) to syntetyczne analogi naturalnie występujących nieorganicznych pirofosforanów, charakteryzujące się obecnością szkieletu P–C–P. Ze względu na ich wysokie powinowactwo do tkanki kostnej oraz różnokierunkową aktywność biologiczną, w tym przeciwnowotworową [1], BP wykazują wysoki potencjał aplikacyjny w chemii medycznej. Skuteczność tych związków w terapii nowotworów można dodatkowo zwiększyć na dwa sposoby: poprzez ich koniugację (łączenie za pomocą wiązania kowalencyjnego) z innymi związkami bioaktywnymi lub stosując je w kombinacji z innymi lekami (bez łączenia chemicznego) w ramach terapii skojarzonej [2-3]. Obie te strategie mogą przyczynić się do zwiększenia efektywności terapii na skutek synergistycznego lub addytywnego działania obu związków. Istotną zaletą koniugatów jest również możliwość ukierunkowanego dostarczania terapeutycznego do tkanki kostnej, co wynika z obecności ugrupowania bisfosfonowego w strukturze otrzymanej hybrydy.

W tym kontekście zaprezentowane zostaną wyniki badań dotyczących syntezy pochodnych α -aminobisfosfonowych oraz oceny ich cytotoksyczności wobec wybranych linii komórkowych. Na podstawie uzyskanych rezultatów wytypowano związek wykazujący najbardziej obiecującą aktywność biologiczną, a następnie zbadano cytotoksyczność jego kombinacji z wybranymi chemioterapeutykami m.in. etopozydem czy kamptotecyną. Ponadto omówione zostaną także wyniki badań nad syntezą koniugatów tej pochodnej z wybranymi związkami biologicznie aktywnymi, takimi jak np. chlorambucyl czy kwas mykofenolowy.

Podziękowanie: Badania współfinansowane ze środków Górnośląsko-Zagłębiowskiej Metropolii w ramach Funduszu Wspierania Nauki (RW/45/2025/2) oraz Politechniki Śląskiej w ramach subwencji na utrzymanie i rozwój potencjału badawczego Młodzi Naukowiec (04/020/BKM26/1158).

1. M. Gnant, P. Clézardin, *Cancer Treat. Rev.*, **2012**, 38, 407–415.
2. Z. Ouyang, H. Li, Z. Zhai, J. Xu, C. R. Dass, A. Qin, K. Dai, *Curr. Drug Targets*, **2018**, 19, 409–421.
3. K. B. Farrell, A. Karpeisky, D. H. Thamm, S. Zinnen, *Bone Rep.*, **2018**, 9, 47–60.



S03 PS30

Amplifikacja sygnału kolorymetrycznego w testach przepływu bocznego z wykorzystaniem katalitycznych nanocząstek platynowców

inż. Karolina Kosińska

*Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego
ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa
ka.kosinska2@student.uw.edu.pl*

Testy przepływu bocznego (LFA) pozostają najszerzej stosowanym formatem diagnostyki przyłózkowej. jednak ich zasadniczym ograniczeniem jest wysoka granica wykrywalności wynikająca z niewystarczającego sygnału znacznika kolorymetrycznego. Nanocząstki metali z grupy platynowców łączą właściwości optyczne klasycznych znaczników koloidalnych z wewnętrzną aktywnością podobną do peroksydazy, co pozwala przekształcić bierny znacznik w katalizator, generujący produkt barwny in situ.

W pracy otrzymano nanocząstki Pd@Pt o średnicy 25 nm, i mezoporowatej strukturze metodą redukcji kwasem askorbinowym. Nanocząstki następnie sprzęgnięto z przeciwciałem monoklonalnym anti-hCG i wykorzystano w układzie kanapkowym. Po zakończeniu migracji próbki i wysuszeniu paska, na membranę aplikowano roztwór 3,3',5,5'-tetrametylobenzyny (TMB) z nadtlaniem wodoru. Katalizowane przez nanocząstki utlenianie TMB prowadziło do powstania nierozpuszczalnego, intensywnie niebieskiego produktu zlokalizowanego w miejscu związanego koniugatu. Intensywność linii kwantyfikowano na podstawie obrazów rejestrowanych aparatem.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że nanozymy platynowców stanowią prostą i kompatybilną z istniejącą architekturą LFA, strategię poprawy czułości, nie wymagającą znacznych modyfikacji formatu testu ani sposobu odczytu wyniku.

Słowa kluczowe: nanozymy, nanocząstki platyny, LFA, TMB, amplifikacja kolorymetryczna, diagnostyka przyłózkowa



S03 PS31

Zastosowanie nanocząstek złota o zróżnicowanej morfologii rdzenia metalicznego do konstrukcji testów przepływu bocznego o obniżonym limicie detekcji

Maja Pawlusińska, Zuzanna Woźniak, Amelia Kostecka, Maciej Bagiński, Wiktor Lewandowski

Zakład Chemii Organicznej i Technologii Chemicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski;

e-mail: m.pawlusinsk@student.uw.edu.pl

Testy przepływu bocznego (LFA) znajdują szerokie zastosowanie w szybkiej diagnostyce ze względu na prostotę wykonania, niski koszt oraz krótki czas uzyskania wyniku. Jednym z ich głównych ograniczeń pozostaje jednak czułość analityczna. Celem pracy było zbadanie wpływu morfologii nanocząstek złota (AuNPs), stosowanych jako reportery kolorymetryczne, na limit detekcji białka C-reaktywnego (CRP) w testach LFA. Porównano nanocząstki sferyczne, nanopręty, nanotrójkąty, nanobipiramidy pokryte warstwą srebra, nanooktaedry i nanocząstki chiralne. Nanocząstki funkcjonalizowano PEG zawierającym grupy tiolowe i karboksylowe, a następnie, po aktywacji grup karboksylowych za pomocą EDC/NHS, koniugowano z przeciwciałami anti-CRP. Morfologię i właściwości optyczne otrzymanych materiałów scharakteryzowano za pomocą transmisyjnej mikroskopii elektronowej (TEM) oraz spektroskopii UV-Vis. Uzyskane koniugaty zastosowano następnie w testach LFA do oznaczania CRP w zakresie stężeń 500-0,1 ng/ml. Dla nanosfer, nanoprętów, nanobipiramid pokrytych warstwą srebra oraz nanooktaedrów granica wykrywalności wyniosła 5 ng/ml, natomiast zastosowanie nanotrójkątów i nanocząstek chiralnych umożliwiło obniżenie LOD do 0,7 ng/ml. Uzyskane wyniki potwierdzają, że kontrola morfologii nanocząstek złota stanowi skuteczną strategię zwiększania czułości testów LFA, a szczególnie obiecujące pod tym względem są nanostruktury o bardziej złożonej, anizotropowej geometrii. Przedstawione podejście otwiera możliwości dalszego projektowania nanocząstek o zoptymalizowanych właściwościach optycznych w celu poprawy parametrów analitycznych szybkich testów diagnostycznych.



S03 PS32

Chitozanowo-laminarynowy biomateriał wzbogacony nanokwiatkami bromelainy jako potencjalny wielofunkcyjny materiał opatrunkowy

Kinga Mylkie^{1,2}, Aleksander Smolarkiewicz-Wyczachowski^{1,2}, Miloslav Machacek³, Klara Konecna⁴, Marta Ziegler-Borowska^{1,2}, Dorota Chelminiak-Dudkiewicz^{1,2}

¹Katedra Chemii Biomedycznej i Polimerów, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń, Polska

²Instytut Studiów Zaawansowanych, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Wileńska 4, 87-100 Toruń, Polska

³Department of Biochemical Sciences, Faculty of Pharmacy in Hradec Kralove, Charles University in Prague, Akademia Heyrovskeho 1203, 500 05 Hradec Kralove, Czech Republic

⁴Department of Biological and Medical Sciences, Faculty of Pharmacy in Hradec Kralove, Charles University, Zborovska 2089, Hradec Kralove 500 03, Czech Republic

adres korespondencyjny;
e-mail: kinga.mylkie@umk.pl

Zakażenia bakteryjne oraz zaburzenia procesu gojenia ran stanowią istotny problem kliniczny, dlatego poszukiwane są wielofunkcyjne biomateriały opatrunkowe łączące odpowiednie właściwości fizykochemiczne z aktywnością biologiczną i dobrą biogodnością. Szczególnie interesującą grupę materiałów stanowią układy oparte na polisacharydach, które ze względu na biodegradowalność, oraz możliwość wspomagania procesów regeneracyjnych znajdują szerokie zastosowanie w projektowaniu nowoczesnych materiałów do leczenia ran.

W ramach przeprowadzonych badań opracowano porowaty biomateriał kompozytowy na bazie chitozanu i laminaryny, wzbogacony hybrydowymi nanokwiatkami bromelainy. Chitozan i laminarynę wykorzystano do otrzymania matrycy polimerowej, natomiast hybrydowe białkowo-nieorganiczne nanostruktury zawierające bromelainę, roślinny enzym proteolityczny, wprowadzono w celu zwiększenia funkcjonalności biologicznej otrzymanego układu. Otrzymany biomateriał poddano kompleksowej charakterystyce obejmującej analizę morfologii, struktury chemicznej, stabilności termicznej oraz właściwości mechanicznych. Jego właściwości biologiczne oceniono na podstawie badań aktywności antyoksydacyjnej, przeciwzapalnej i przeciwdrobnoustrojowej, a także hemokompatybilności oraz cytokompatybilności. Opracowany materiał charakteryzował się korzystnymi właściwościami fizykochemicznymi, nie wykazywał działania hemolitycznego oraz cechował się dobrą kompatybilnością z fibroblastami MRC-5. Ponadto wykazywał obiecującą aktywność antyoksydacyjną i przeciwdrobnoustrojową, istotną z punktu widzenia zastosowania w materiałach wspomagających leczenie ran.

Uzyskane wyniki wskazują, że porowate biomateriały chitozanowo-laminarynowe wzbogacone nanokwiatkami bromelainy mogą stanowić interesującą platformę do projektowania wielofunkcyjnych materiałów opatrunkowych. Dalsze badania, obejmujące bardziej zaawansowane modele biologiczne oraz badania *in vivo*, pozwolą na pełniejszą ocenę ich potencjału aplikacyjnego.

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu nr 2022/47/D/NZ7/01821.

[1] K. Niziołek, D. Słota, A. Sobczak-Kupiec, *Materials* 2024, 17(17), 4220.

[2] D. Chelminiak-Dudkiewicz, M. Machacek, K. Konecna, O. Jandourek, J. Kejmarová, K. Mylkie, A. Smolarkiewicz-Wyczachowski, M. Wujec, M. Ziegler-Borowska, *Materials & Design* 2026, 261, 115374.



S03 PS33

Synteza oraz ocena aktywności przeciwdrobnoustrojowej pochodnych 2,5-diketopiperazyn zawierających reszty lizyny i argininy

Jakub Bonisławski¹, Beata Kolesińska¹, Dorota Kręgiel²

¹*Instytut Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka; 90-543 Łódź, ul. Żeromskiego 114, 90-543 Łódź;* ²*Katedra Biotechnologii Środowiskowej Wydział Biotechnologii i Nauk o Żywności, ul. Wólczajska 171/173, 90-530 Łódź*

256162@edu.p.lodz.pl

Diketopiperazyny (DKP), to najmniejsze możliwe peptydy cykliczne. Powstają one w reakcji kondensacji dwóch α -aminokwasów i charakteryzują się obecnością sztywnego, sześciocząłowego pierścienia laktamowego. Dzięki swojej unikalnej budowie: mały rozmiar, odporność na działanie enzymów proteolitycznych oraz zdolność do łatwego przenikania przez błony komórkowe, diketopiperazyny posiadają niezwykle wszechstronną aktywność biologiczną.

W kontekście kryzysu antybiotykooporności (AMR) to właśnie aktywność przeciwbakteryjna i wpływ na komunikację bakterii sprawia, że związki te są szeroko testowane. Aktywność przeciwbakteryjna diketopiperazyn wynika z: inhibicji syntezy kwasów tłuszczowych (działanie na białko FabH), zaburzania syntezy RNA, szerokiego spektrum działania [1]. Diketopiperazyny wpływają na Quorum Sensing (QS), uniemożliwiając tym samym tworzenie biofilmu [2]. Peptydy przeciwbakteryjne (AMP – Antimicrobial Peptides), nazywane często „antybiotykami natury”, to związki zawierające od 12 do 50 reszt aminokwasowych, które stanowią pierwszą linię obrony układu odpornościowego niemal wszystkich organizmów żywych [3]. Większość naturalnych AMP posiada dwie unikalne cechy, które determinują ich zabójczą skuteczność wobec mikrobów: dodatni ładunek elektryczny (kationowość) oraz amfifilowość.

W naszym zespole podjęliśmy próby otrzymania związków, które łączyłyby właściwości DKP oraz AMP. Przyjęliśmy, że właściwości takie powinny mieć DKP tworzone z aminokwasów zasadowych. Syntezę przeprowadziliśmy metodą syntezy peptydów w fazie ciekłej (solution-phase peptide synthesis), wykorzystując chronione aminokwasy: Boc-Arg(Tos)-OH, Boc-Lys(2-Cl-Z)-OH, Boc-L-Lys-OH oraz ester metylowy N ω -nitro-L-argininy. Jako odczynnik kondensujący w syntezie dipeptydów zastosowaliśmy DMT/NMM/TsO (triazynowy odczynnik kondensujący nowej generacji) [4]. W kolejnym etapie przeprowadzono reakcję cyklizacji prowadzącą do otrzymania pochodnych 2,5-diketopiperazyny. Otrzymano następujące związki:

- cykliczna pochodna Arg-Arg,
- cykliczna pochodna Lys-Arg
- cykliczna pochodna Lys-Arg

Struktury otrzymanych produktów potwierdzono metodami spektrometrii mas wysokiej rozdzielczości (HRMS) oraz spektroskopii magnetycznego rezonansu jądowego (¹H NMR, 700 MHz). Otrzymane związki poddano ocenie aktywności przeciwbakteryjnej wobec wybranych szczepów bakterii Gram-dodatnich i Gram-ujemnych stosując standardowe metody.

[1] de Carvalho, M.P.; Abraham W.-R. *Curr. Med. Chem.*, **2012**, 19(21), 3564-3577.

[2] Beneš, R.; Koval, D.; Švec, I.; Macůrková, A.; Vrchotová, B.; Honzík, T.; Kalenchak, K.; Bárta, J.; Bártová, V.; Bedmiček, J.; Lorenc, F.; Smetana, P.; Kyselka, J. *ACS Agric. Sci. Technol.*, **2025**, 5(8), 1681-1692

[3] Oliveira Júnior, N.G.; Souza, C.M.; Buccini, D.F.; Cardoso, M.H.; Franco, O.L. *Nat. Rev. Microbiol.*, **2025**, 23, 687-700.

[4] Kolesińska, B.; Rożniakowski, K.K.; Frączyk, J.; Relich, I.; Papini, A.M.; Kamiński, Z.J. *Eur. J. Org. Chem.*, **2015**, 401-408.



S03 PS34

Zastosowanie wysokorozdzielczej mikroskopii fluorescencyjnej STED do obrazowania układów teranostycznych *in vivo*

Dawid Szymczuk¹, Karolina H. Markiewicz¹, Joanna Wołosewicz¹, Katarzyna Niemirowicz-Laskowska², Halina Car², Agnieszka Z. Wilczewska¹

¹ Zakład Polimerów i Syntezy Organicznej, Uniwersytet w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok

² Zakład Farmakologii Doświadczalnej, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku, ul. Szpitalna 37, 15-295 Białystok

d.szymczuk@uwb.edu.pl

Zaawansowane techniki obrazowania fluorescencyjnego oraz mikroskopia superrozdzielcza, takie jak STED (Stimulated Emission Depletion), odgrywają coraz większą rolę we współczesnych badaniach biologicznych. Metody te umożliwiają obrazowanie struktur i procesów zachodzących w komórkach oraz tkankach z rozdzielczością poniżej granicy dyfrakcyjnej światła, pozwalając na analizę organizacji struktur subkomórkowych, lokalizacji biomolekuł oraz dynamiki procesów biologicznych.

Rozwój tego typu metod jest szczególnie istotny w kontekście chorób nowotworowych, które należą do głównych przyczyn zgonów na świecie. Dane statystyczne wskazują na systematyczny wzrost liczby zachorowań i zgonów związanych z nowotworami, co podkreśla potrzebę opracowywania skuteczniejszych i bardziej selektywnych metod terapii. W ostatnich latach coraz większą uwagę poświęca się inteligentnym układom dostarczania leków, umożliwiającym kontrolowany transport substancji aktywnych do komórek nowotworowych przy jednoczesnym ograniczeniu efektów ubocznych.

W niniejszej pracy przedstawiono polimerowe nośniki leków zawierające pochodne kwasu litocholowego, które poddano funkcjonalizacji fluoroforami na drodze kowalencyjnego znakowania. Doksorubicynę wykorzystano jednocześnie jako lek przeciwnowotworowy i znacznik fluorescencyjny, natomiast pochodną pirenu zastosowano jako dodatkową sondę fluorescencyjną. Tak zaprojektowane układy mogą znaleźć zastosowanie w jednoczesnym dostarczaniu i obrazowaniu leków, umożliwiając lokalizację zarówno samego nośnika, jak i transportowanego leku w komórkach oraz środowisku biologicznym. Zastosowanie dwóch niezależnych znaczników fluorescencyjnych może dodatkowo pozwalać na równoczesną obserwację dystrybucji nośnika i leku, dostarczając informacji na temat mechanizmów transportu oraz oddziaływań badanych układów z komórkami.

Podziękowania: badania zostały sfinansowane przez NCN, grant OPUS nr 2019/35/B/ST5/03391. Analizy wykonano w Centrum BioNanoTechno Uniwersytetu w Białymstoku. Badania biologiczne zostały sfinansowane przez Uniwersytet Medyczny w Białymstoku (B.SUB.25.215 HC, B.SUB.25.257 KNL).

1. F. Bray, et al. CA Cancer J. Clin., 2024, 74, 229
2. D. Szymczuk, et al. J. Mater. Chem. B, 2026, 14, 3947
3. D. Szymczuk, et al. RSC Adv., 2025, 15, 14246
4. A. Wnętrzak, et al. BBA – Biomembranes, 2024, 1866, 184294
5. G. Vicidomini, et al. Nat. Methods, 2011, 8, 571



S03 PS35

Opracowanie i wstępna optymalizacja nanocząstek lipidowych jako potencjalnych nośników składników aktywnych z grupy retinoidów

Marta Marzec, Adriana Zając, Izabela Nowak

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej;
Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Polska;
nowakiza@amu.edu.pl

Nanocząstki lipidowe (LNs) stanowią obiecujące nośniki substancji aktywnych w przemyśle kosmetycznym, ponieważ mogą chronić związki wrażliwe na czynniki środowiskowe, ułatwiać ich wprowadzenie do formułacji kosmetycznej oraz wspierać kontrolowane dostarczanie do struktur skóry [1-3]. Szczególne znaczenie mają składniki czynne z grupy retinoidów, np. palmitynian retinyli, ester witaminy A; oraz roślinny związek fenolowy opisywany jako funkcjonalna alternatywa dla retinoidów – bakuchiol, charakteryzujący się dobrą tolerancją skórą [4].

Celem badań było opracowanie i wstępna optymalizacja składu nanocząstek lipidowych przeznaczonych do inkorporacji bakuchiolu lub palmitynianu retinyli. W pierwszym etapie przeprowadzono dobór lipidu stałego (ang. *lipid screening*), na podstawie którego jako lipid stały wybrano Imwitor 900K (monostearynian gliceryny) dla nośników palmitynianu retinyli oraz Softisan 601 (mieszanina mono- i diglicerydów kwasów tłuszczowych C12–C18) – dla bakuchiolu. Dyspersje nanocząstek lipidowych otrzymywano dwiema metodami: z wykorzystaniem homogenizacji wysokoobrotowej (ang. *high shear homogenization*, HSH) oraz sonikacji (z uwzględnieniem różnych czasów prowadzenia procesu). Dla każdej metody przygotowano układ dziewięciu próbek, zgodnie z założonym planem czynnikowym 3^2 (Statistica 13, Statsoft, Polska). Czynniki niezależnymi były zawartość lipidu stałego (2; 4; 6% wag.) oraz surfaktantu niejonowego – Tween 80 (1; 1,5; 2% wag.), przy stałej obecności bromku cetylotrimetyloamoniowego (0,5% wag.) i cholanu sodu (0,1% wag.). Czynniki zależnymi były jednorodność oraz transparentność dyspersji oceniane w skali 1–5. Uzyskane wyniki wskazały, że najkorzystniejsze właściwości użytkowe wykazywały zazwyczaj próbki zawierające najniższy poziom lipidu stałego. Dyspersje z matrycą lipidową, stanowiącą mieszaninę mono- i diacyloglicerydów kwasów tłuszczowych, były bardziej transparentne, natomiast układy zawierające wyłącznie monostearynian gliceryny charakteryzowały się większą mlecznością, co mogło je bardziej predysponować do występowania zmian o charakterze niestabilności. Wyniki stanowią podstawę do dalszej charakterystyki fizykochemicznej i oceny stabilności zaprojektowanych układów jako potencjalnych nośników palmitynianu retinyli oraz bakuchiolu.

[1] Souto E.B., Baldim I., Oliveira W.P., Rao R., Yadav N., Gama F.M., Mahant S. SLN and NLC for topical, dermal, and transdermal drug delivery, *Expert Opinion on Drug Delivery*, **2020**, 17(3), 357-377.

[2] Pawłowska M., Marzec M., Jankowiak J., Nowak I. Solid Lipid Nanoparticles Incorporated with Retinol and Pentapeptide-18-Optimization, Characterization, and Cosmetic Application, *International Journal of Molecular Sciences*, **2024**, 25(18), 10078.

[3] Dąbrowska M., Souto E.B., Nowak I. Lipid Nanoparticles Loaded with Iridoid Glycosides: Development and Optimization Using Experimental Factorial Design, *Molecules*, **2021**, 26(11), 3161.

[4] Dhaliwal S., Rybak I., Ellis S.R., Notay M., Trivedi M., Burney W., Vaughn A.R., Nguyen M., Reiter P., Bosanac S., Yan H., Foolad N., Sivamani R.K. Prospective, randomized, double-blind assessment of topical bakuchiol and retinol for facial photoageing, *British Journal of Dermatology*, **2019**, 180(2), 289-296.

Krajowa Biblioteka Związków Chemicznych – Dostęp do Nowatorskich Metod Poszukiwania Substancji o Aktywności Biologicznej

Marcin Śleszyński, Dorota Borowiecka, Zbigniew J. Leśnikowski

*Instytut Biologii Medycznej PAN, Krajowa Biblioteka Związków Chemicznych POL-OPENSREEN;
ul. Lodowa 106, 93-232 Łódź;
msleszynski@pol-openscreen.pl*

Krajowa Biblioteka Związków Chemicznych (KBZCh), funkcjonująca w ramach infrastruktury POL-OPENSREEN, stanowi ogólnopolską, zintegrowaną platformę umożliwiającą efektywniejsze wykorzystanie związków chemicznych powstających w krajowych jednostkach naukowych i badawczych. Każdego roku w polskich laboratoriach syntetyzowane są liczne nowe cząsteczki opracowywane na potrzeby projektów badawczych, które po ich zakończeniu często pozostają niewykorzystane[1]. KBZCh odpowiada na ten istotny problem poprzez systematyczne gromadzenie, standaryzowane katalogowanie oraz wielokierunkowe bioprofilowanie takich związków, a następnie ich udostępnianie do badań przesiewowych prowadzonych zarówno przez ośrodki akademickie, jak i partnerów przemysłowych – w celu identyfikacji nowych, potencjalnie przełomowych właściwości biologicznych i aplikacyjnych[2].



W ramach działalności KBZCh realizowane są analizy podstawowych właściwości fizykochemicznych i biologicznych, obejmujące m.in. ocenę rozpuszczalności, lipofilowości, wartości pKa oraz cytotoksyczności. Istotnym elementem jest także badanie aktywności przeciwdrobnoustrojowej i przeciwwirusowej, co pozwala na wczesną identyfikację kandydatów o znaczeniu farmaceutycznym. Wybrane próbki włączane są ponadto do europejskiej infrastruktury badawczej EU-OPENSREEN ERIC[3], z którą KBZCh ściśle współpracuje, otwierając drogę do pogłębionego, wysokoprzepustowego profilowania biologicznego w skali międzynarodowej. Dotychczasowe wyniki wskazują na obecność licznych

związków o obiecującej aktywności przeciwbakteryjnej, przeciwgrzybiczej i przeciwwirusowej, co potwierdza wysoką jakość i potencjał zgromadzonej kolekcji.

Kluczowym wymiarem działalności KBZCh jest również aktywne wspieranie współpracy interdyscyplinarnej poprzez łączenie środowiska chemików syntetyków z zespołami zajmującymi się biologią, farmacją oraz rozwojem nowych technologii. Istotną rolę w tym zakresie odgrywają cykliczne Warsztaty Krajowej Biblioteki Związków Chemicznych POL-OPENSREEN, które stanowią platformę wymiany wiedzy, inicjowania partnerstw badawczych oraz rozwijania innowacyjnych kierunków badań. W ten sposób KBZCh nie tylko zwiększa efektywność wykorzystania tworzonych w Polsce zasobów chemicznych, lecz także aktywnie współtworzy ekosystem sprzyjający powstawaniu nowych rozwiązań o wysokim potencjale aplikacyjnym.

[1] Brennecke P. et al., EU-OPENSREEN: A Novel Collaborative Approach to Facilitate Chemical Biology. *SLAS Discovery* **2019**, 24 (3), 398–413. <https://doi.org/10.1177/2472555218816276>.

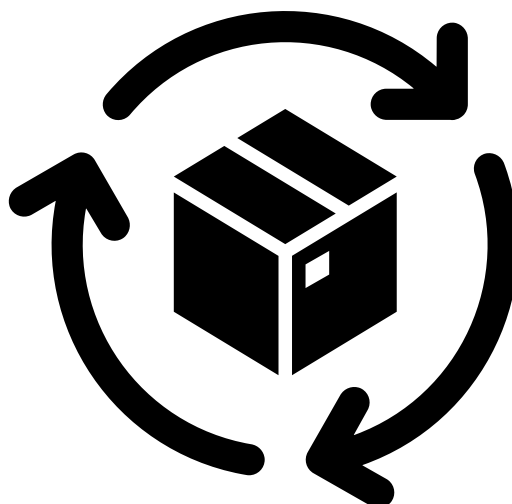
[2] McGilvray, A. Compound Screening: Fresh Hunting Ground. *Nature* **2016**, 533 (7602), S65–S67. <https://doi.org/10.1038/533S65a>.

[3] Škuta, C.; Müller, T.; Voršilák, M.; Popr, M.; Epp, T.; Skopelitou, K. E.; Rossella, F.; Herzog, K.; Stechmann, B.; Gribbon, P.; Bartůněk, P. ECBD: European Chemical Biology Database. *Nucleic Acids Research* **2025**, 53 (D1), D1383–D1392. <https://doi.org/10.1093/nar/gkae904>.



S04

Materiały funkcjonalne i fizykochemia powierzchni





Wykłady sekcyjne



S04 WS01

Piany na bazie biosurfaktantów: jak oddziaływania molekularne kształtują stabilność i funkcjonalność pian

Marcel Krzan,

Weronika Kieres, Sonia Kudłacik-Kramarczyk, Małgorzata Nattich-Rak, Piotr Warszyński
Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk
ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków
e-mail: marcel.krzan@ikifp.edu.pl

Piany stabilizowane biosurfaktantami stanowią rozwijającą się klasę materiałów miękkich, łączących wysoką aktywność międzyfazową z biodegradowalnością i niską toksycznością. W przeciwieństwie do syntetycznych surfaktantów, biosurfaktanty – takie jak białka, glikolipidy czy surfaktanty cukrowe – często tworzą uporządkowane warstwy adsorpcyjne, prowadzące do odmiennych mechanizmów stabilizacji pian i właściwości reologicznych. Zrozumienie oddziaływań molekularnych zachodzących w tych układach jest kluczowe dla projektowania zrównoważonych formułacji przeznaczonych do zastosowań w żywności, kosmetyce, farmacji i ochronie środowiska.

Szczególne znaczenie mają biosurfaktanty o złożonej budowie molekularnej, zdolne do tworzenia wiązań wodorowych, oddziaływań hydrofobowych i elektrostatycznych. Prowadzi to do powstawania gęstych, elastycznych warstw adsorpcyjnych na granicy faz powietrze–woda, które decydują o stabilności pian. Wśród naturalnych środków pianotwórczych wyróżniają się saponiny roślinne. Ich amfifilowa budowa, obejmująca aglikon triterpenowy lub steroidowy połączony z łańcuchami cukrowymi, sprzyja tworzeniu zwartych warstw międzyfazowych o wysokiej elastyczności dylatacyjnej, zapewniających zwiększoną stabilność pian.

Badania pokazują, że właściwości pian biosurfaktantowych zależą zarówno od oddziaływań w warstwie adsorpcyjnej, jak i od obecności dodatków. Wiązania wodorowe oraz oddziaływania elektrostatyczne mogą reorganizować strukturę międzyfazową i modyfikować reologię powierzchni. Dodatki takie jak glicerol, mocznik czy chlorek choliney wpływają na organizację saponin i wody międzyfazowej, zmieniając elastyczność oraz stabilność błon pianowych poprzez modulację sieci wiązań wodorowych i ładunku międzyfazowego.

Istotną strategią projektowania są również układy wieloskładnikowe. Mieszaniny biosurfaktantów oraz ich kombinacje z polimerami, nanocząstkami lub klasycznymi surfaktantami często wykazują efekty synergistyczne, prowadzące do szybszej adsorpcji, korzystniejszych właściwości reologicznych i większej stabilności pian. Odpowiedni dobór składu, pH, siły jonowej i charakteru oddziaływań międzycząsteczkowych pozwala dostosowywać właściwości pian do konkretnych zastosowań.

Wykład przedstawia mechanistyczne podstawy funkcjonowania pian biosurfaktantowych, ze szczególnym uwzględnieniem układów opartych na saponinach. Omówione zostaną zależności między oddziaływaniami molekularnymi a makroskopowymi właściwościami pian, analizowane z wykorzystaniem reologii międzyfazowej, spektroskopii i symulacji molekularnych. Zrozumienie tych mechanizmów stanowi podstawę projektowania nowej generacji pian pochodzenia biologicznego o kontrolowanej stabilności, funkcjonalności i wysokiej kompatybilności środowiskowej.

Podziękowania

Praca została sfinansowana przez:

- i) Narodowe Centrum Nauki (granty nr 2022/45/B/ST8/02058 oraz 2024/53/B/ST8/03269),
- ii) Fundusz Badań Statutowych Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk.



S04 WS02

Implementacja wybranych wyników badań naukowych do praktyki przemysłowej na przykładzie przemysłu kosmetycznego

Tomasz Wasilewski^{1,2}, Zofia Hordyjewicz-Baran³, Maciej Zegarski², Marcin Łukaszewicz⁴

¹Uniwersytet Radomski im. Kazimierza Pułaskiego w Radomiu, ul. Chrobrego 7, 26-600 Radom

²Onlybio.life S.A., ul. Jakóba Hechlińskiego 6, 85-825 Bydgoszcz

³Sieć Badawcza Łukasiewicz –Instytut Chemii Surowców Odnawialnych,
ul. Energetyków 9, 47-225 Kędzierzyn-Koźle

⁴InventionBio S.A., ul. Jakóba Hechlińskiego 4, 85-825 Bydgoszcz
tomasz.wasilewski@urad.edu.pl

W ostatnich latach obserwuje się wyraźną tendencję wśród konsumentów do zwracania szczególnej uwagi na bezpieczeństwo produktów codziennego użytku. W przypadku kosmetyków przeznaczonych do higieny poszukiwane są preparaty zawierające substancje pochodzenia naturalnego, spełniające założenia tak zwanych produktów zrównoważonych oraz charakteryzujące się ograniczonym negatywnym oddziaływaniem na środowisko naturalne. Szczególnie ważne jest, aby w procesie wytwarzania surowców, a później wyrobów gotowych, wykorzystywać materiał stanowiące produkt uboczny (np. w przemyśle rolno-spożywczym). W aktualnie prowadzonych badaniach naukowych szczególną uwagę zwraca się na oddziaływanie składników produktu na skórę użytkownika. Coraz bardziej rygorystyczne stają się zwłaszcza wymagania stawiane produktom, dotyczące ograniczenia działania drażniącego oraz wysuszającego.

Przy opracowywaniu nowoczesnych kosmetyków przeznaczonych do higieny niezbędna jest wiedza z zakresu mechanizmów działania tego typu preparatów, szczególnie w kontekście ich wpływu na stan skóry po procesie mycia. Prowadzone badania dotyczą zwłaszcza nowych składników i form produktów oraz sposobów ich aplikowania. W niniejszej pracy zaprezentowano rezultaty badań z tego zakresu.

Przedstawiono empiryczną analizę możliwości wytwarzania kosmetyków naturalnych przeznaczonych do higieny, zawierających w swoim składzie komponenty wytwarzane na drodze procesów biotechnologicznych. W pracach wykorzystywano m.in. surowce zawierające lewan, kwas poliglutaminowy czy surfaktynę sodową.

We wszystkich przypadkach opracowano receptury i technologie wytwarzania preparatów, a następnie wytworzono prototypy produktów. W kolejnym etapie poddawano je badaniom mającym na celu określenie parametrów związanych z bezpieczeństwem i funkcjonalnością. Proponowane nowe rozwiązania recepturowe oparto o surowce powszechnie dostępne w skali przemysłowej – celem umożliwienia implementacji proponowanych rozwiązań w praktyce produkcyjnej.

W trakcie zrealizowanych badań przemysłowych wykazano, że uzyskane prototypy produktów posiadają wysoki potencjał aplikacyjny i są ciekawą alternatywą dla obecnie stosowanych rozwiązań. Rezultaty mogą stanowić cenne źródło informacji i punkt startowy w pracach rozwojowych prowadzonych w firmach produkujących kosmetyki.

Podziękowanie: badania zostały zrealizowane w ramach projektu POIR.01.01.01-00-1433/19 sfinansowanego przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju.



S04 WS03

Sorbenty impregnowane zawierające atomy siarki

Grzegorz Wójcik, Karolina Zinkowska, Zbigniew Hubicki

*Katedra Chemii Nieorganicznej, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii UMCS;
Pl. Marii Skłodowskiej-Curie 2, 20-031 Lublin;
grzegorz.wojcik2@umcs.pl*

Łatwa dostępność do urządzeń elektronicznych oraz bardzo częsta wymiana na nowe modele powoduje, że ich konsumpcja stale się zwiększa. Jeśli weźmiemy pod uwagę krótki czas użytkowania tych urządzeń to ilość odpadów będzie wzrastać w przyszłych latach. Prognozuje się wzrost ilości odpadów elektronicznych do 74,7 miliona ton w 2030 roku. Odpady elektroniczne są bardzo cenne gdyż znajdują się w nich metale szlachetne jak: złoto, platyna, pallad oraz srebro. Oprócz metali szlachetnych występuje w nich również miedź oraz nikiel. Ceny metali szlachetnych w ostatnich latach znacząco wzrosły. Dla przykładu cena jednego grama złota wyniosła w lipcu 2026 roku 490 zł, podczas gdy w lipcu 2023 roku było to 250 zł [1]. Biorąc pod uwagę ich ceny, odzysk metali szlachetnych jest ekonomicznie uzasadniony, dlatego poszukiwanie nowych metod poprzez stosowanie selektywnych sorbentów jest bardzo istotnym zagadnieniem nie tylko badawczym ale i przemysłowym.

W procesach hydrometalurgicznych do odzysku jonów metali stosuje się metody strącaniowe, ekstrakcyjne oraz sorpcyjne. W metodach sorpcyjnych używa się anionitów oraz jonitów selektywnych szczególnie dla małych stężeń jonów metali w roztworze. Jednak ekstrakcja wymaga stosowania rozpuszczalników, a niektóre jonity mogą być drogie. Połączenie pozytywnych zalet ekstrakcji i wymiany jonowej jest możliwe poprzez przygotowanie sorbentów impregnowanych, których właściwości sorpcyjne są potwierdzone wieloma przykładami opisanymi w literaturze. W trakcie wykładu będą prezentowane sorbenty impregnowane, które zostały otrzymane nową metodą bez stosowania rozpuszczalników. Metoda ta została opatentowana [2] i jest stosowana podczas otrzymywania nowych sorbentów selektywnych na jony metali szlachetnych. Sorbenty impregnowane mogą być stosowane nie tylko w układach modelowych, ale również w roztworach rzeczywistych otrzymanych po roztwarzaniu elementów zużytej elektroniki. Odpady elektroniczne są cennym surowcem do pozyskiwania złota i innych metali szlachetnych, ale również pierwiastków, które znajdują się na liście surowców krytycznych. Zostaną omówione przykłady praktycznych zastosowań sorbentów impregnowanych zawierających donorowe atomy siarki w odzysku jonów metali szlachetnych z roztworów uzyskanych podczas roztwarzania odpadów elektronicznych.

[1] <https://tavex.pl/wykres-ceny-zlota-kurs/> (dostęp z dnia 15.07.2026)

[2] G. Wójcik, K. Zinkowska, Sposób otrzymywania polimerowych sorbentów” PL 247284



S04 WS04

Nowa generacja domieszek do kompozytów cementowych dla zrównoważonego budownictwa

Izabela Kłapiszewska^{1,*}, Piotr Latos², Łukasz Kłapiszewski^{3,4}, Anna Chrobok²,
Teofil Jesionowski³, Agnieszka Ślosarczyk¹

¹ Politechnika Poznańska, Wydział Inżynierii Lądowej i Transportu, ul. Piotrowo 5, 60-138 Poznań

² Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, ul. Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice

³ Politechnika Poznańska, Wydział Technologii Chemicznej, ul. Berdychowo 4, 61-131 Poznań

⁴ Politechnika Poznańska, Interdyscyplinarne Centrum Ekotechnologii, Piotrowo 2, 60-965 Poznań

*e-mail: izabela.klapiszewska@put.poznan.pl

Rosnące wymagania związane z dekarbonizacją sektora budowlanego oraz koniecznością ograniczenia zużycia zasobów naturalnych stwarzają potrzebę opracowania nowej generacji kompozytów cementowych o obniżonym śladzie środowiskowym. Jednym z perspektywicznych kierunków ich rozwoju jest zastosowanie nanotechnologii, umożliwiającej kształtowanie procesów hydratacji, mikrostruktury oraz właściwości użytkowych materiałów cementowych już na poziomie nanometrycznym. Praktyczne wykorzystanie nanocząstek jest jednak ograniczone ich wysoką powierzchnią właściwą i wynikającą z niej tendencją do agregacji i aglomeracji. Zjawiska te utrudniają uzyskanie jednorodnej dyspersji nanomateriałów w matrycy cementowej, zmniejszają ich efektywną powierzchnię właściwą i mogą ograniczać oczekiwany efekt modyfikacji.

W prezentowanych badaniach przedstawiono koncepcję nowej generacji domieszek opartych na synergicznym połączeniu nanocząstek ze związkami jonowymi i rozpuszczalnikiem głęboko eutektycznym. Zastosowanie związków jonowych ma na celu poprawę stabilności dyspersji nanocząstek oraz ograniczenia ich tendencji do tworzenia aglomeratów. Tak zaprojektowane układy umożliwiają bardziej efektywne wykorzystanie wysoko rozwiniętej powierzchni nanocząstek oraz ich potencjału jako centrów nukleacji produktów hydratacji. Jednocześnie specyficzne właściwości fizykochemiczne cieczy jonowej mogą wpływać na przebieg hydratacji i proces kształtowania mikrostruktury matrycy cementowej.

Proponowane podejście pozwala traktować układ nanotlenek–związek jonowy jako wielofunkcyjną domieszkę, której działanie wykracza poza konwencjonalną modyfikację właściwości mieszanki cementowej. Kontrola dyspersji nanocząstek oraz oddziaływań na granicy faz stwarza możliwość bardziej świadomego projektowania mikrostruktury, a w konsekwencji właściwości mechanicznych i trwałościowych kompozytów cementowych. Rozwiązanie to może wspierać projektowanie materiałów o zmniejszonym udziale klinkieru i obniżonym śladzie węglowym, przy jednoczesnym zachowaniu wymaganych parametrów użytkowych. Hybrydowe układy nanotlenek–związek jonowy stanowią zatem perspektywiczny kierunek rozwoju zaawansowanych domieszek dla niskoemisyjnych i trwałych kompozytów cementowych, zgodnych z założeniami zrównoważonego budownictwa.

Podziękowania: Praca została zrealizowana w ramach projektu badawczego nr 2022/45/B/ST8/02288 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki.

Nanocząstki superparamagnetyczne zdobione metalami szlachetnymi jako uniwersalne platformy do zastosowań bioanalitycznych i terapeutycznych

Paweł Stańczak^{1,2}, Lorico Delos Santos Lapitan Jr¹, Areta Czerwińska², Jan Górniaszek^{1,2}, Maciej Trzaskowski², Monika Śmigielska^{1,2}, Ilona Grabowska-Jadach², Artur Dybko², Mariusz Pietrzak^{1,2}

¹ Dział Diagnostyki Medycznej, Centrum Zaawansowanych Materiałów i Technologii CEZAMAT, Politechnika Warszawska

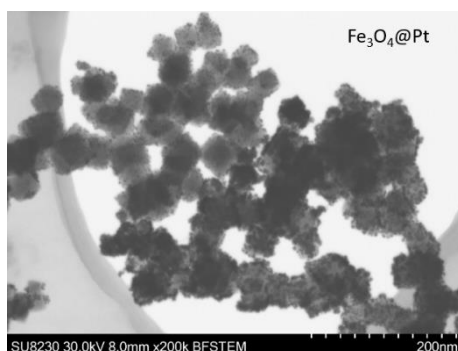
adres korespondencyjny: ul. Poleczki 19, 02-822 Warszawa

² Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska

adres korespondencyjny: ul. Stanisława Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa

e-mail: mariusz.pietrzak@pw.edu.pl

Nanocząstki pozwalają na łączenie wielu pożądaných właściwości i funkcjonalności w obrębie jednej struktury. Mogą być to właściwości superparamagnetyczne, aktywność katalityczna, w tym taka (lub takie) naśladująca aktywność wybranych enzymów, interesujące właściwości optyczne, bogactwo grup funkcyjnych do wiązania receptorów, itp.. Takie nanocząstki są coraz chętniej wykorzystywane w bioanalityce, remediacji zanieczyszczeń oraz łączonych terapiach przeciwnowotworowych. W ramach niniejszej prezentacji omówione zostaną badania nad opracowaniem nowoczesnych multifunkcyjnych nanoplatform wykorzystujących superparamagnetyczne rdzenie z magnetytu zdobione jednym lub dwoma metalami szlachetnymi (rys. 1), a także przedstawiona zostanie charakterystyka takich cząstek [1-3]. Omówiony zostanie wpływ dalszych modyfikacji takich nanocząstek na ich potencjał aplikacyjny i przedstawiona zostanie szersza perspektywa zastosowań otrzymanych nanocząstek obejmująca biotesty, biosensory oraz terapię fototermiczną i chemodynamiczną.



Rys. 1. Zdjęcie mikroskopowe nanocząstek $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{Pt}$.

Podziękowania: Badania te zostały sfinansowane przez IDUB i Politechnikę Warszawską w ramach umowy programowej POSTDOC 6 PW - 310/Z01/Z10/2024 oraz POSTDOC 3 - 1820/269/Z01/2022.

1. P. Ivanova, M. Drozd, K. Michrowski, S.Karoń, M. Mazurkiewicz-Pawlicka, M. Pietrzak, Au-X (X=Pt/Ru)- decorated magnetic nanocubes as bifunctional nanozyme labels in colorimetric, magnetically-enhanced, one-step sandwich CRP immunoassay, *Biosensors and Bioelectronics*, 237, 2023, 115511
2. L. D. S. Lapitan Jr, J. O. Górniaszek, M. Trzaskowski, M. Pietrzak, Modulating Peroxidase-like Activity of $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{Pt}$ @poly-LDOPA and Its Application as Multifunctional Magnetic Probes Towards SARS-CoV-2 Detection, *Applied Sciences* 16, 2026, no. 4: 1858
3. L. D. S. Lapitan Jr, A. M. Czerwińska, J. O. Górniaszek, M. Trzaskowski, R. Wróblewski, I. Grabowska-Jadach, A. Dybko, M. Pietrzak, Multifunctional polyphenol-coated $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{Pt}$ nanocomposites for in vitro NIR-induced cancer chemodynamic and photothermal therapy, w recenzji w *Nanoscale*



S04 WS06

Wybrane luminescencyjne nanomateriały oparte o jony ziem rzadkich: wytwarzanie, charakterystyka fotofizyczna i innowacyjne zastosowania

Stefan Lis

Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza,
Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Poland
e-mail: stefan.lis@amu.edu.pl

W wykładzie omówione zostaną, głównie w oparciu o badania własne, wybrane układy nanomateriałów zawierające jony pierwiastków ziem rzadkich (pzzr), wykazujące efektywne właściwości luminescencyjne. Ze względu na unikatowe właściwości pzzr, takie nanomateriały znajdują liczne zastosowania w wielu innowacyjnych zastosowaniach. Przedstawione zostaną wyniki badań nad wytwarzaniem i pogłębioną charakterystyką fizykochemiczną (strukturalną i spektroskopową) nanoluminoforów domieszkowanych jonami lantanowców Ln^{3+} (także Ln^{2+}), w wybranych nanomateriałach oraz ich hybrydowych układów powierzchniowo sfunkcjonalizowanych. Takie nanoluminofory (NL) i nanoluminofory upkonwertujące (UCNL), bazujące na matrycach nieorganicznych (np. fluorkach, fosforanach, wanadanach) domieszkowanych jonami Ln, a także zawierające inne cząsteczki przyłączone do ich powierzchni, umożliwiają tworzenie nanomateriałów charakteryzujących się wielobarwną, przestrajalną luminescencją, wielofunkcyjnymi właściwościami (np. typu rdzeń-powłoka, funkcjonalizowanymi powierzchniowo, luminescencyjno-magnetycznymi, etc.).

Pokazane zostaną przykłady wybranych układów NL i UCNL domieszkowane Ln. Tego rodzaju materiały mogą być stosowane z powodzeniem jako czujniki optyczne, umożliwiając pomiar zmian ciśnienia i temperatury w nanotermometrii i/lub nanomanometrii [1,2]. Wybrane NL i UCNL domieszkowane Ln^{3+} oraz ich funkcjonalizowane układy okazały się doskonałymi i użytecznymi modyfikatorami luminescencyjnymi lub luminescencyjno-magnetycznymi do ochrony (np. ważnych dokumentów, markowej odzieży) przed fałszerstwem [3]. Ponadto, znajdują liczne zastosowania do celów biomedycznych [4] i analitycznych [5]. Luminescencyjne nanocząstki domieszkowane jonami Ln^{3+} w układach funkcjonalizowanych pożądanymi cząsteczkami ligandów organicznych (np.: nanocząstki $\text{LaF}_3:\text{Tb}^{3+}$, Ce^{3+} @ $\text{SiO}_2\text{-NH}_2$ z aspiryną) lub uczulone ligandem organicznym (np.: $\text{SrF}_2:\text{Eu}^{3+}$ pokryte adenozyną), wykazały wysoką hemozgodność i mogą być bezpiecznie stosowane w badaniach biomedycznych. Opracowaliśmy również wysoce czułe i niezwykle selektywne analityczne metody fluorescencyjne, oparte o transfer energii od analitu do jonu Tb^{3+} (Eu^{3+}), (nanokryształy: $\text{LaF}_3:\text{Eu}^{3+}$ pokryte kwasem dipikolinowym, lub $\text{LaF}_3:\text{Tb}^{3+}$ pokryte kwasem furano-2-karboksylowym) służące do oznaczania form specjacyjnych metali (np. Cu^{2+} , Al^{3+}) w rzeczywistych próbkach wody.

- [1] M. Runowski, A. Shyichuk, A. Tyminski, T. Grzyb, V. Lavín, S. Lis, ACS Appl. Mater. Interfaces 2018, 10(20), 17269–17279.
- [2] S. Goderski, M. Runowski, P. Woźny, V. Lavín, S. Lis, ACS Appl. Mater. Interfaces 2020, 12 (36), 40475-40485.
- [3] M. Skwirczyńska, M. Runowski, P. Kulpiński, S. Lis, Carbohydr. Polym. 2019, 206, 742–748.
- [4] D. Kwiatek, L. Mrówczyńska, N. Stopikowska, M. Runowski, A. Lesicki, S. Lis, ChemMedChem 2020, 15, 1490.
- [5] V. N K. B. Adusumalli, S. Lis, Y. I. Park, P. Woźny, J. Mater. Chem. C. 2024, 7, 17678–17687.



S04 WS07

Zaawansowane materiały pod kontrolą światła: innowacyjne fotoinicjatory dla druku 3D i 4D

Joanna Ortyl^{1,2,3}, Filip Petko^{1,2}, Andrzej Świeży^{1,4}, Mariusz Galek², Patryk Szymaszek¹, Monika Topa-Skwarczyńska¹, Magdalena Jankowska¹, Dominika Krok-Janiszewska¹, Patrycja Środa¹, Katarzyna Starzak¹, Paweł Niezgoda¹, Agnieszka Sysło¹, Małgorzata Kowalewska¹, Weronika Wałczyk¹, Małgorzata Noworyta¹, Kacper Piskorz¹

Afiliacja:

¹Politechnika Krakowska, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Warszawska 24, 31-155 Kraków

²Photo HiTech Ltd., Bobrzyńskiego 14, 30-348 Kraków, Polska

³Photo4Chem Ltd., Lea 114, 30-133 Kraków, Polska

⁴AGH w Krakowie, Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki, al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
e-mail: joanna.ortyl@pk.edu.pl

Druk 3D oparty na procesach fotopolimeryzacji stał się jedną z kluczowych technologii wytwarzania addytywnego, umożliwiając precyzyjne kształtowanie struktur 2D i 3D o złożonej geometrii. Kluczową rolę w tych procesach odgrywają fotoinicjatory – związki zdolne do generowania aktywnych centrów reakcji pod wpływem promieniowania świetlnego. W ostatnich latach obserwuje się intensywny rozwój innowacyjnych fotoinicjatorów kationowych i rodnikowych aktywnych w zakresie światła widzialnego, co otwiera nowe możliwości dla fotopolimeryzacji materiałów funkcjonalnych, w tym systemów o wysokiej przezroczystości optycznej, biogodnych czy o zredukowanej migracji produktów reakcji.

W wystąpieniu zostaną omówione najnowsze kierunki projektowania fotoinicjatorów przeznaczonych do inicjowania polimeryzacji rodnikowej i kationowej pod wpływem światła widzialnego, ze szczególnym uwzględnieniem zjawisk transferu ładunku, synergii w układach wielokomponentowych oraz wpływu struktury chemicznej na efektywność inicjowania i głębokość utwardzania. Przedstawione zostaną wybrane przykłady zastosowań w technologiach 2D (powłoki, lakiery, tusze drukarskie) oraz w zaawansowanych metodach druku 3D, takich jak stereolitografia (SLA) i DLP (Digital Light Processing).

Szczególne uwagi zostaną poświęcone przejściu od klasycznego druku 3D do druku 4D, w którym czas staje się dodatkowym wymiarem projektowania materiału. Zastosowanie fotoinicjatorów aktywnych w świetle widzialnym umożliwia tworzenie struktur zdolnych do programowalnej zmiany kształtu, właściwości mechanicznych lub funkcjonalnych w odpowiedzi na bodźce zewnętrzne (światło, temperatura, wilgotność, pH). Zaprezentowane zostaną przykłady „inteligentnych” materiałów fotoutwardzalnych oraz strategie projektowania systemów polimerowych, w których światło pełni rolę precyzyjnego narzędzia sterującego zarówno procesem wytwarzania, jak i późniejszą „aktywacją” funkcji materiału.

Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki (NCN) w ramach projektów OPUS nr UMO-2021/41/B/ST5/04533 oraz SONATA BIS nr UMO-2025/58/E/ST11/00334.



S04 WS08

Kompleksowa ocena funkcjonalnych organiczno-mineralnych materiałów kompozytowych na podstawie biotestów wodnych ekstraktów oraz harmonizacji podejść normatywnych Unii Europejskiej i Ukrainy

Viktoria Paientko

*Chuiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine,
17 O. Mudrak Str., Kyiv 03164, Ukraine
payentkovv@gmail.com*

Funkcjonalne organiczno-mineralne materiały kompozytowe otrzymywane metodą modyfikacji mechanochemicznej naturalnych nośników mineralnych stanowią obiecującą grupę materiałów do zastosowań w kosmetologii, farmacji, medycynie oraz ochronie środowiska. Właściwości fizykochemiczne powierzchni matrycy mineralnej determinują procesy sorpcji, immobilizacji oraz kontrolowanego uwalniania substancji biologicznie czynnych, bezpośrednio wpływając na właściwości użytkowe gotowego materiału.

W pracy podsumowano wyniki badań materiałów kompozytowych opartych na kaolinie, haloizycie, montmorylonicie, bentonicie, saponicie, wermikulicie, diatomicie, amorficznej krzemionce, hydroksyapatycie, biowęglu oraz kompozytach typu „bursztyn–diatomit–białko”, modyfikowanych proszkami surowców roślin leczniczych. Do charakterystyki materiałów zastosowano dyfrakcję rentgenowską (XRD), spektroskopię w podczerwieni (FTIR), analizę powierzchni właściwej metodą BET, oznaczanie potencjału ζ , właściwości kwasowo-zasadowych powierzchni, pH oraz przewodności elektrycznej wodnych ekstraktów.

Wykazano, że aktywność biologiczna materiałów kompozytowych zależy nie tylko od charakteru składnika organicznego, lecz również od właściwości fizykochemicznych powierzchni matrycy mineralnej, które regulują procesy desorpcji oraz przechodzenia substancji biologicznie czynnych do środowiska wodnego. Do kompleksowej oceny tych procesów zastosowano biotesty wodnych ekstraktów z wykorzystaniem organizmów testowych *Sorghum saccharatum*, *Sinapis alba* oraz *Lepidium sativum*. Oceniano zdolność kiełkowania nasion, długość korzenia, długość pędu oraz indeks kiełkowania, co umożliwia identyfikację zarówno potencjalnej fitotoksyczności, jak i efektu biostymulującego badanych kompozycji.

Podejście metodyczne opracowano na podstawie analizy porównawczej międzynarodowych i krajowych dokumentów normalizacyjnych. Wykorzystano wytyczne OECD TG 208 *Terrestrial Plant Test: Seedling Emergence and Seedling Growth Test*, międzynarodowe normy ISO 11269-1 oraz ISO 11269-2, ich zharmonizowane odpowiedniki krajowe DSTU ISO 11269-1 i DSTU ISO 11269-2, a także znormalizowany system testowy Phytotoxkit™. Takie podejście zapewnia porównywalność uzyskanych wyników z praktyką międzynarodową oraz tworzy podstawy metodyczne do oceny bezpieczeństwa i funkcjonalnej skuteczności nowych materiałów kompozytowych. Zaproponowany zestaw metod fizykochemicznych oraz biotestów wodnych ekstraktów umożliwia określenie zależności pomiędzy właściwościami powierzchni, kinetyką uwalniania substancji biologicznie czynnych a zintegrowaną odpowiedzią biologiczną roślin testowych. Stanowi to naukową podstawę do projektowania, optymalizacji oraz standaryzacji funkcjonalnych organiczno-mineralnych materiałów kompozytowych zgodnie z aktualnymi wymaganiami Unii Europejskiej i Ukrainy.



S04 WS09

Folie chitozanowe plastyfikowane oligoglicerolami: wpływ stopnia polimeryzacji na właściwości mechaniczne i barierowe

Gabriela Dudek, Dominika Kluska, Andrzej Milewski

Afiliacja;

*Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów, Gliwice, Polska;
gmdudek@polsl.pl*

Folie chitozanowe są obiecującymi materiałami do zastosowań w ochronie żywności. Ich praktyczne wykorzystanie jest jednak ograniczone między innymi przez niewielką elastyczność oraz wrażliwość na działanie wilgoci. Wprowadzenie związków plastyfikujących może poprawić elastyczność folii, lecz jednocześnie wpływa na ich wytrzymałość, strukturę oraz właściwości barierowe. Istotne znaczenie ma zatem odpowiedni dobór zarówno rodzaju, jak i zawartości plastyfikatora.

Celem pracy było zbadanie wpływu oligogliceroli, zastosowanych jako dodatki plastyfikujące do matrycy chitozanowej, na właściwości otrzymanych folii. W tym celu przebadano oligoglicerole o różnym stopniu polimeryzacji, a tym samym różnej długości łańcucha oligomerowego, oraz folie zawierające diglicerol w różnych stężeniach. W pierwszej części badań zastosowano diglicerol (PG2) w ilości od 30 do 70% wag. w stosunku do suchej masy chitozanu. W drugiej części porównano folie zawierające 70% wag. oligogliceroli o różnym stopniu polimeryzacji: PG2, PG3, PG4 i PG6.

Folie otrzymano metodą wylewania z roztworu. Określono ich właściwości mechaniczne, morfologiczne, strukturalne, termiczne i optyczne, a także ich oddziaływanie z wodą. Zbadano również przepuszczalność pary wodnej, tlenu i dwutlenku węgla. Możliwość zastosowania otrzymanych materiałów do ochrony żywności oceniono na podstawie siedmiodniowego testu przechowalniczego bananów pokrytych badanymi kompozycjami.

Zwiększenie zawartości PG2 od 30 do 70% wag. spowodowało wzrost wydłużenia przy zerwaniu z około 69 do 128% oraz zmniejszenie wytrzymałości na rozciąganie z około 20 do 9 MPa. Najmniejszą przepuszczalność pary wodnej, wynoszącą $5.5 \cdot 10^{-8} \text{ g} \cdot \text{mm} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{m}^{-2} \cdot 24 \text{ h}^{-1}$, uzyskano dla folii zawierającej 30% wag. PG2. Zwiększanie stopnia polimeryzacji oligoglicerolu prowadziło natomiast do zmniejszenia elastyczności i zwiększenia wytrzymałości folii. Największe wydłużenie przy zerwaniu wykazywała folia zawierająca PG2, natomiast największą wytrzymałość na rozciąganie - folia z PG6.

Obserwacje SEM wykazały, że wszystkie folie miały zwartą i ciągłą strukturę, bez widocznych pęknięć, porów i oznak rozdzielania faz. Wyniki analiz FTIR i XRD wskazały, że wprowadzenie oligogliceroli powodowało zmiany w oddziaływaniach międzycząsteczkowych i uporządkowaniu matrycy chitozanowej. Nie zaobserwowano jednak jednoznacznej zależności pomiędzy charakterem tych zmian a stopniem polimeryzacji oligoglicerolu.

W teście przechowalniczym powłoka zawierająca PG2 najskuteczniej ograniczała utratę twardości bananów, natomiast powłoka z PG6 przyczyniła się do najmniejszego ubytku ich masy.

Uzyskane wyniki wskazują, że zarówno zawartość, jak i stopień polimeryzacji oligoglicerolu wpływają na właściwości folii chitozanowych. Odpowiedni dobór tych parametrów umożliwia uzyskanie materiałów o pożądanej elastyczności, wytrzymałości i właściwościach barierowych, dostosowanych do określonego zastosowania.

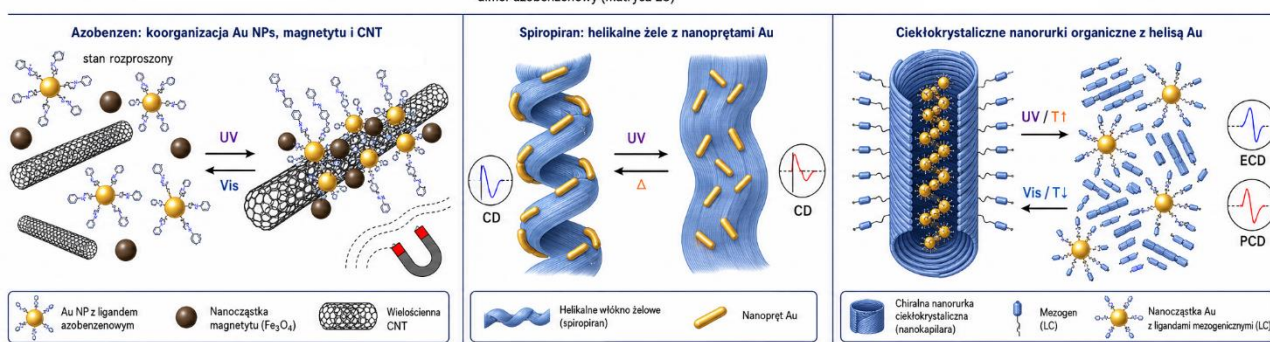
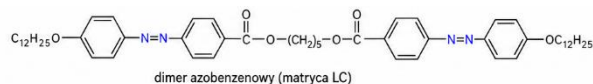
Fotoprzełączalne ligandy organiczne jako narzędzie sterowania samoorganizacją nanomateriałów plazmonowych i magnetycznych

Michał M. Wójcik, Ewelina Tomczyk, Bartosz Smereczyński, Wiktor Lewandowski, Michał Sawczyk

Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa, Polska
ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa;
mwojcik@chem.uw.edu.pl

Odwracalna, bezkontaktowa kontrola przestrzennej organizacji nanocząstek należy do kluczowych wyzwań inżynierii dynamicznych nanomateriałów organiczno-nieorganicznych. Ligandy organiczne wyposażone w fotoprzełączalne bloki budulcowe, pochodne azobenzenu oraz spiropiranu, pod wpływem światła zmieniają geometrię, moment dipolowy oraz charakter oddziaływań międzycząsteczkowych. Gdy ligandy te są zakotwiczone na powierzchni nanocząstek lub współtworzą z nimi rusztowania supramolekularne, przełączanie na poziomie molekularnym propaguje do skali nadcząsteczkowej, odwracalnie sterując samoorganizacją oraz wynikającymi z niej właściwościami optycznymi, magnetycznymi i chiroptycznymi [1–3].

Strategię tę ilustrują trzy komplementarne układy. Azobenzenowe nanocząstki złota koorganizują się z aromatycznie funkcjonalizowanym magnetytem i nanorurkami węglowymi poprzez sprzężenie π – π oraz wolna para– π , tworząc selektywne, magnetycznie adresowalne hybrydy. Helikalne żełe spiropiranowe matrycuja nanopręty złota, przekładając chiralność rusztowania na plazmoniczny dichroizm kołowy. Azobenzenowe nanorurki ciekłokrystaliczne narzucają z kolei helikalne ułożenie nanocząstek, generując sprzężoną chiralność elektronową i plazmoniczną.



Rys. 1. Fotoprzełączalne ligandy organiczne (azobenzen, spiropiran) jako wspólny element sterujący odwracalną samoorganizacją nanomateriałów funkcjonalnych: hybryd magnetyczno-plazmonicznych z nanorurkami węglowymi (lewo), chiralnych kompozytów plazmonicznych na bazie żelu spiropiranowego (środek) oraz helikalnych zespołów nanocząstek w nanorurkach ciekłokrystalicznych (prawo).

Wspólnym mianownikiem jest ligand organiczny pełniący rolę nadrzędnego przełącznika solwatacji, sprzężenia międzycząsteczkowego i helikalności rusztowania, czynnika nie wymagającego dodatkowych reagentów, odwracalnego i ortogonalnego względem temperatury oraz pola magnetycznego, co czyni go dogodnym narzędziem projektowania adaptacyjnych materiałów chiroptycznych i magnetycznych.

Literatura

- [1] M. Sawczyk, Y. Han, S. Sen, B. Smereczyński, P. Król, M. M. Wójcik, Adv. Funct. Mater. 2025, e04830.
- [2] E. Tomczyk, M. Bagiński, D. Szepe, W. Lewandowski, M. Wójcik, Adv. Mater. Interfaces 2025, 12, e00476.
- [3] A. Jędrych, M. Pawlak, E. Górecka, W. Lewandowski, M. M. Wójcik, ACS Nano 2023, 17, 5548–5560.



S04 WS12

Od funkcjonalnych nanopowłok i nanonośników do hierarchicznych biomateriałów – możliwości metody layer-by-layer

Tomasz Kruk, Marta Kolasińska-Sojka, Lilianna Szyk-Warszyńska, Magdalena Prochner, Piotr Warszński, Krzysztof Szczepanowicz

*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk;
ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków;
krzysztof.szczepanowicz@ikifp.edu.pl*

Właściwości funkcjonalnych nanomateriałów i biomateriałów są w dużej mierze determinowane przez strukturę oraz skład chemiczny ich powierzchni. Ładunek, hydrofilowość, topografia i obecność grup funkcyjnych wpływają na stabilność koloidalną, adsorpcję białek, adhezję komórek i mikroorganizmów oraz wiązanie i uwalnianie substancji aktywnych. Kontrolowane projektowanie powierzchni jest zatem kluczowym elementem tworzenia materiałów do zastosowań biomedycznych. Jednym z najbardziej wszechstronnych podejść do funkcjonalizacji powierzchni jest sekwencyjna adsorpcja przeciwnie naładowanych nanoobjektów, w tym polielektrolitów, nanocząstek, określana jako metoda warstwa po warstwie (layer-by-layer, LbL). Umożliwia ona otrzymywanie struktur o kontrolowanym składzie, grubości, ładunku powierzchniowym i organizacji wewnętrznej, zarówno na powierzchniach płaskich i trójwymiarowych, jak i wokół nanocząstek oraz nanonośników. Badania rozpoczęto od klasycznych wielowarstw polielektrolitowych, takich jak PAH/PSS oraz PLL/PGA, które stanowiły modelowe układy do analizy mechanizmu sekwencyjnej adsorpcji, wzrostu filmu, stabilności i właściwości powierzchniowych. Zdobyte doświadczenia umożliwiły przejście od prostych układów polimerowych do struktur hybrydowych, w których wybrane warstwy wzbogacano lub zastępowano funkcjonalnymi nanoobjektami. Metodę LbL zastosowano następnie do otrzymywania ultracienkich nanokompozytowych powłok przeciwdrobnoustrojowych zawierających nanocząstki srebra lub miedzi. Ich wzrost i strukturę analizowano za pomocą spektroskopii UV-Vis, elipsometrii, mikrowagi kwarcowej z monitorowaniem dyssypacji oraz skaningowej mikroskopii elektronowej. Badania z udziałem bakterii Gram-ujemnych i Gram-dodatnich potwierdziły ograniczenie adhezji i przeżywalności mikroorganizmów na zmodyfikowanych powierzchniach. Kolejnym kierunkiem było otrzymywanie polimerowych nanonośników o wielowarstwowych otoczkach z biokompatybilnych polielektrolitów. Nanordzenie o wielkości 80–100 nm pokrywano warstwami PLL i PGA. Pegylacja powierzchni, immobilizacja przeciwciał oraz wprowadzanie nanocząstek tlenku żelaza umożliwiały uzyskanie układów przeznaczonych do ukierunkowanego transportu substancji aktywnych, wykazujących jednocześnie właściwości magnetyczne i teranostyczne. Rozwinięciem i integracją obu podejść są hierarchiczne powłoki polielektrolitowe zawierające nanonośniki jako wbudowane rezerwuary substancji aktywnych. Rozdzielenie funkcji matrycy powierzchniowej od funkcji magazynowania i uwalniania związku aktywnego pozwala niezależnie kontrolować właściwości nanonośnika oraz architekturę powłoki. Stwarza to możliwość projektowania powierzchni zapewniających lokalne, długotrwałe, sekwencyjne lub wieloskładnikowe uwalnianie substancji terapeutycznych, między innymi z implantów i innych wyrobów medycznych. Przedstawione przykłady pokazują, że LbL nie jest jedynie techniką nanoszenia kolejnych warstw, lecz modułową strategią konstruowania materiałów o programowalnej architekturze. Umożliwia integrację funkcji przeciwdrobnoustrojowych, przeciwadhezyjnych, magnetycznych, diagnostycznych i terapeutycznych, stanowiąc uniwersalne narzędzie projektowania funkcjonalnych nanopowłok, nanonośników i hierarchicznych biomateriałów.

Podziękowanie: Praca ta została sfinansowana ze środków przeznaczonych na badania statutowe IKIFP PAN oraz projektu OPUS 2025/59/B/ST5/02760.



Komunikaty sekcyjne



S04 KS01

Ekstrakcja pożyczkowa jako strategia otrzymywania funkcjonalnych ekstraktów dla kosmetyków naturalnych

Konrad Terpiłowski*, Patrycja Sykut*, Tomasz Wasilewski**

**Katedra Zjawisk Międzyfazowych, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej w Lublinie, ** Wydział Nauk Medycznych i Nauk o Zdrowiu, Uniwersytet Radomski
Plac Marii Curie Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin
terpil@umcs.pl*

Rosnące zapotrzebowanie konsumentów na naturalne i zrównoważone produkty kosmetyczne stymuluje poszukiwanie innowacyjnych, ekologicznych metod pozyskiwania związków bioaktywnych z materiałów odpadowych pochodzenia roślinnego. W odpowiedzi na te wyzwania opracowano autorską koncepcję ekstrakcji pożyczkowej (loan extraction) [1,2], polegającą na wykorzystaniu wyłącznie składników „pożyczonych” bezpośrednio z końcowej receptury projektowanego kosmetyku jako medium ekstrakcyjnego. Takie podejście eliminuje konieczność stosowania dodatkowych rozpuszczalników oraz upraszcza proces technologiczny. Do ekstrakcji związków bioaktywnych zastosowano ekstrakcję micelną opartą na wodnych roztworach łagodnych surfaktantów oraz zielonych rozpuszczalnikach, co pozwoliło całkowicie wyeliminować użycie toksycznych rozpuszczalników organicznych. Przeprowadzone badania wykazały wysoką skuteczność roztworów micelarnych i zielonych rozpuszczalników w izolacji kluczowych związków bioaktywnych, takich jak katechina, epikatechina, kwas winowy, rutyna oraz L-lizyna, w porównaniu z ekstrakcją prowadzoną z użyciem czystej wody. Włączenie otrzymanych ekstraktów do receptur kosmetycznych pozwoli zachować wymaganą stabilność mechaniczną, termiczną i mikrobiologiczną oraz odpowiednie właściwości fizykochemiczne, w tym optymalną lepkość i zdolność do tworzenia piany. Jednocześnie wykazano, że obecność wyekstrahowanych substancji w strukturach micelarnych przyczynia się do zmniejszenia potencjału drażniącego zastosowanych surfaktantów. Opracowana koncepcja ekstrakcji pożyczkowej stanowi innowacyjne, wydajne i bezodpadowe rozwiązanie technologiczne, zgodne z zasadami zielonej chemii oraz gospodarki o obiegu zamkniętym. Strategia ta umożliwi projektowanie bezpiecznych, niedrażniących kosmetyków naturalnych o zwiększonej funkcjonalności, przy jednoczesnym ograniczeniu zużycia surowców i negatywnego wpływu procesu produkcyjnego na środowisko.

1. Wasilewski, T.; Hordyjewicz-Baran, Z.; Malorna, K.; Dresler, E.; Sabura, E.; Zegarski, M.; Stanek-Wandzel, N. Studies on the Use of Loan Extraction to Produce Natural Shower Gels (Cosmetic) Based on Grape Pomace Extracts—The Effect of the Type of Surfactant Borrowed. *Molecules* 2025, 30, 3709. <https://doi.org/10.3390/molecules30183709>
2. Orzechowicz, W.; Wasilewski, T.; Hordyjewicz-Baran, Z.; Stanek-Wandzel, N.; Malorna, K.; Fleszer, J. The Use of the Idea of Loan Extraction to Produce a Skin Care Serum (Cosmetic) Containing a High Concentration of Bioactive Ingredients Isolated from *Calendula officinalis* L. Petals. *Appl. Sci.* 2025, 15, 12444. <https://doi.org/10.3390/app152312444>



S04 KS02

Funkcjonalne kosmetyki do ciała w formie stałej z ekstraktami z wycieków z winogron

Tomasz Wasilewski, Zofia Hordyjewicz-Baran

*Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Chemii Surowców Odnawialnych
ul. Energetyków 9, 47-225 Kędzierzyn-Koźle
zofia.hordyjewicz@icso.lukasiewicz.gov.pl*

W pracy przedstawiono wyniki badań dotyczących opracowania innowacyjnych, łagodnych dla skóry preparatów w kostce przeznaczonych do mycia ciała. W hydrofobowej matrycy mieszaniny alkoholu cetylowego i stearylowego zdyspergowano stałe cząstki składające się ze związku powierzchniowo czynnego, regulatora pH i kationowego polimeru kondycjonującego. Opracowane formułę wzbogacono o kompozycje zapachowe oraz ekstrakty roślinne otrzymane z wycieków winogronowych, będących produktem ubocznym przemysłu winiarskiego. Preparaty opracowano i wytworzono zgodnie z koncepcją „ekstrakcji pożyczkowej”, która polega na zapożyczeniu składników z końcowej receptury kosmetyku i ich zastosowania jako medium ekstrakcyjne związków bioaktywnych z materiału roślinnego, a następnie wprowadzeniu uzyskanego ekstraktu do masy kosmetycznej [1,2].

Opracowano dwie wersje preparatów kosmetycznych przeznaczonych do mycia ciała w formie kostek, różniące się zastosowanym rozpuszczalnikiem amfifilowym. W recepturach wykorzystano dwa typy glikoli naturalnego pochodzenia: 1,3-propanodiol oraz 1,2-pentanodiol, które wykorzystano jako medium ekstrakcyjne do otrzymania ekstraktów roślinnych. Otrzymane ekstrakty scharakteryzowano pod względem zawartości wybranych związków fenolowych, całkowitej zawartości polifenoli oraz aktywności przeciwutleniającej z wykorzystaniem odpowiednio technik LC-MS/MS oraz UV-Vis. Opracowane modelowe preparaty kosmetyczne poddano ocenie pod kątem właściwości użytkowych, obejmujących m. in. parametry barwy, zdolność pianotwórczą oraz potencjał drażniący.

Przeprowadzone badania wykazały, że opracowane preparaty do mycia ciała w formie kostki, stanowiące dyspersję cząstek surfaktantu w hydrofobowej matrycy i wzbogacone ekstraktami z wycieków winogronowych, charakteryzują się korzystnymi właściwościami użytkowymi oraz wysokim profilem bezpieczeństwa. Uzyskane wyniki wskazują, że opracowane preparaty do mycia ciała mogą stanowić interesującą i bardziej przyjazną dla skóry alternatywę dla konwencjonalnych mydeł w kostce a także preparatów myjących w formie płynnej.

Literatura

- [1] T. Wasilewski, Z. Hordyjewicz-Baran, M. Zarębska, N. Stanek, E. Zajszy-Turko, M. Tomaka, T. Bujak, Z. Nizioł-Łukaszewska, Sustainable Green Processing of Grape Pomace Using Micellar Extraction for the Production of Value-Added Hygiene Cosmetics, *Molecules* 27 (2022) 2444-2471.
- [2] Z. Hordyjewicz-Baran, T. Wasilewski, M. Zarębska, N. Stanek-Wandzel, E. Zajszy-Turko, M. Tomaka, M. Zagórska-Dziok, Micellar and solvent loan chemical extraction as a tool for the development of natural skin care cosmetics containing substances isolated from grapevine buds, *Applied Sciences* 14 (2024) 1420–1440.



S04 KS03

Ciekłokrystaliczne żywice epoksydowe o uporządkowanej strukturze molekularnej

Beata Mossety-Leszczak¹, Maciej Kisiel¹, Magdalena Włodarska², Beata Strachota³, Adam Strachota³

¹*Wydział Chemiczny, Politechnika Rzeszowska, Al. Powstańców Warszawy 12, 35-029 Rzeszów, mossety@prz.edu.pl, m.kisiel@prz.edu.pl*

²*Instytut Fizyki, Politechnika Łódzka, ul. Wólczańska 219, 90-924 Łódź, magdaw@p.lodz.pl*

³*Instytut Chemii Makromolekularnej, Czeska Akademia Nauk, Heyrovskeho nam. 2, CZ-162 00 Praga, beata@imc.cas.cz, strachota@imc.cas.cz*

Ciekłokrystaliczne usieciowane materiały polimerowe charakteryzują się wysoką odpornością na pękanie i zerwanie, dużym modułem sprężystości, szczególnie w kierunku orientacji grup mezogenicznych, bardzo dobrymi właściwościami barierowymi, niskim współczynnikiem rozszerzalności cieplnej. Wykazują ponadto anizotropię mechaniczną i optyczną. Właściwości te wynikają z uporządkowanego układu sztywnych mezogenów w sieci polimerowej, stabilizowanego podczas procesu utwardzania. Stopień uporządkowania i ilość tych ugrupowań w strukturze sieci w istotny sposób wpływają na właściwości materiału końcowego. Często układy tego typu otrzymuje się z ciekłokrystalicznych żywic epoksydowych, modyfikowanych dodatkowo poprzez włączenie w strukturę sieci np. napełniaczy.

Monodomenowe, uporządkowane żywice epoksydowe wykazują cechy, które są przydatne i oczekiwane w wytwarzaniu m.in. matryc kompozytowych w mikroelektronice oraz w przemyśle lotniczym i kosmicznym. Sieciowanie prekursorów ciekłokrystalicznych w polu porządkującym, takim jak pole magnetyczne lub elektryczne, umożliwia otrzymanie materiałów z jednorodnie zorientowanych w określonym kierunku cząsteczkami mezogenicznymi.

Celem przeprowadzonych badań było otrzymanie uporządkowanych sieci epoksydowych oraz zastosowanie ich jako matryce dla anizotropowych nanonapełniaczy. W badaniach wykorzystano dwa rodzaje ciekłokrystalicznych żywic epoksydowych różniących się budową przyłączonych spacerów. Monomery usieciowano aminą aromatyczną w obecności lub bez pola magnetycznego. Jako nanonapełniacz zastosowano nanorurki z difenylfosforanu glinu o średnicy 100-200 nm i długości 1-5 μm . Po utwardzeniu przeprowadzono analizy DSC oraz badania WAXS-2D w celu oceny stopnia uporządkowania molekularnego. Uzyskane wyniki potwierdziły, że zastosowanie pola magnetycznego podczas utwardzania prowadzi do powstania uporządkowanej struktury kompozytów.



Dofinansowano ze środków Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach Programu „Regionalna Inicjatywa Doskonałości”, nr umowy RID/SP/0032/2024/01



Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego



S04 KS04

Samoorganizacja nanocząstek złota z zastosowaniem matryc ciekłokrystalicznych: od struktur helikalnych do chiralnych filmów plazmonicznych

Maciej Bagiński, Dorota Szepke, Martyna Wasiluk, Wiktor Lewandowski

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii ul. Pasteura 1 02-093 Warszawa

mbaginski@chem.uw.edu.pl

Kontrolowana organizacja nanocząstek plazmonicznych w struktury chiralne stanowi istotne wyzwanie współczesnej nanotechnologii ze względu na możliwość otrzymywania materiałów wykazujących silne i selektywne oddziaływanie ze światłem spolaryzowanym kołowo.

W przedstawionych badaniach wykorzystano zdolność odpowiednio zaprojektowanych związków ciekłokrystalicznych do tworzenia hierarchicznych, helikalnych nanofilamentów. Racjonalna funkcjonalizacja powierzchni nanocząstek złota zapewnia ich kompatybilność z matrycą i umożliwia kooperatywną samoorganizację obu komponentów. Nanocząstki uczestniczą w procesie nukleacji struktur ciekłokrystalicznych, a następnie są selektywnie lokowane na powierzchni skręconych nanowstążek, prowadząc do powstawania uporządkowanych struktur helikalnych. Strategia ta umożliwia organizację zarówno plazmonicznych nanocząstek złota o zróżnicowanej morfologii rdzenia metalicznego jak również kropek kwantowych.

Spontaniczne łamanie symetrii podczas wzrostu nanofilamentów prowadzi do powstawania domen o określonej skrętności, natomiast zjawisko synchronizacji chiralności umożliwia jej propagację na większych odległościach. Helikalne uporządkowanie nanocząstek skutkuje pojawieniem się silnej odpowiedzi chirooptycznej w zakresie rezonansu plazmonowego. Rozwinięciem tej koncepcji było otrzymanie makroskopowych chiralnych filmów poprzez zastosowanie matrycy ciekłokrystalicznej, domieszki chiralnej i nanocząstek złota. Otrzymane materiały wykazują plazmonowy dichroizm kołowy, którego położenie spektralne może być kontrolowane poprzez zmianę geometrii nanocząstek, a intensywność odpowiedzi może być odwracalnie przełączana za pomocą temperatury. Miękki charakter matrycy umożliwia ponadto formowanie i przenoszenie materiału na elastyczne podłoża, prowadząc do rozciągliwych filmów o przestrajalnych właściwościach chirooptycznych.

Drugie życie biomasy – od odpadów do funkcjonalnych adsorbentów węglowych

Emilia Gromala, Piotr Nowicki

*Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań
piotr.nowicki@amu.edu.pl*

Rosnące wymagania w zakresie ochrony środowiska oraz potrzeba efektywnego zagospodarowania znacznych ilości odpadów rolniczych i przemysłowych przyczyniają się do intensyfikacji badań nad wykorzystaniem biomasy jako surowca do produkcji adsorbentów węglowych. Szczególną rolę w tej grupie odgrywają biowęgla aktywne, które ze względu na silnie rozwiniętą strukturę porowatą oraz korzystne właściwości powierzchniowe stanowią obiecującą alternatywę dla konwencjonalnych materiałów adsorpcyjnych. Mając to na uwadze, w ramach niniejszej pracy podjęto próbę otrzymania biowęgla aktywnych z trzech rodzajów biomasy odpadowej o zróżnicowanej strukturze i składzie chemicznym (łodyg dziurawca zwyczajnego, fusów kawy oraz pestek porzeczki czarnej) z zastosowaniem wspomaganą mikrofalowo aktywacji chemicznej, a następnie scharakteryzowano ich właściwości fizykochemiczne oraz oceniono zdolności sorpcyjne w kontekście potencjalnych zastosowań środowiskowych.



Uzyskane wyniki jednoznacznie wskazują, że odpadowa biomasa roślinna stanowi bardzo wartościowy prekursor do wytwarzania funkcjonalnych adsorbentów węglowych, przy czym właściwości otrzymywanych biowęgla aktywnych są w dużej mierze determinowane zarówno przez rodzaj surowca, jak i charakter chemiczny zastosowanego czynnika aktywującego. Wykazano, że aktywacja chemiczna z użyciem kwasu fosforowego(V) sprzyja powstawaniu materiałów o znacznie lepiej rozwiniętej strukturze porowatej oraz wyższej efektywności sorpcyjnej w porównaniu z analogicznymi materiałami aktywowanymi węglanem sodu. Zastosowany wariant aktywacji wpływa również na zawartość domieszek mineralnych, kwasowo-zasadowy charakter powierzchni, gęstość ładunku powierzchniowego oraz potencjał elektrokinetyczny biowęgla, czyli parametry kluczowe z punktu widzenia procesów adsorpcyjnych. Przeprowadzone testy sorpcyjne wykazały, że najwyższą aktywnością adsorpcyjną wobec modelowych zanieczyszczeń organicznych i nieorganicznych charakteryzuje się biowęgiel otrzymany z łodyg dziurawca zwyczajnego. Jego parametry pojemnościowe są porównywalne z adsorbentami komercyjnymi, co wskazuje na wysoki potencjał aplikacyjny tego materiału oraz uzasadnia potrzebę dalszej optymalizacji procedury jego wytwarzania.

Biomasa odpadowa z cukrowni – perspektywiczny i niskokosztowy prekursor węgla aktywnych

Robert Wolski, Wiktoria Pruchniewicz, Robert Pietrzak

*Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej;
 ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;
 robert.wolski@amu.edu.pl*

W ciągu ostatnich lat rosnąca aktywność człowieka oraz związany z nią wzrost uprzemysłowienia doprowadziły do istotnego zanieczyszczenia środowiska, produktami codziennego użytku takimi jak preparaty farmaceutyczne oraz kosmetyczne. Skala tego zjawiska obejmuje kraje uprzemysłowione jak i rozwijające się, co stanowi poważny problem w skali globalnej. Źródłem tych zanieczyszczeń są: gospodarstwa domowe, fermy hodowlane, szpitale, fabryki i oczyszczalnie ścieków [1]. Przedostają się one do zbiorników wodnych, wód podziemnych powodując ich akumulację oraz trwałe skażenie [2]. Spośród różnych zanieczyszczeń farmaceutycznych szczególną uwagę zwracają niesteroidowe leki przeciwzapalne (NLPZ), antybiotyki i hormony ze względu na nieustannie rosnącą ich konsumpcję [3]. Na przykład ibuprofen jest jednym z najczęściej stosowanych farmaceutyków na świecie a jego konsumpcja tylko w Europie szacowana jest na około 4000 ton rocznie. NLPZ były wykrywane zarówno w ściekach, jak i w rzekach oraz zbiornikach wodnych [4]. Dlatego ważne jest opracowanie skutecznych metod usuwania wyżej wymienionych zanieczyszczeń.

Wysłodki buraczane stanowią produkt uboczny, uzyskiwany w wyniku procesu wysładzania buraków cukrowych. Polska, jako trzeci największy producent cukru w Unii Europejskiej, produkuje około 3,45 mln ton wysłódków rocznie. Obecność ligniny w wysłódkach, w szczególności jej jednostek aromatycznych oraz wiązań eterowych, ma istotny wpływ na zachowanie się materiału podczas aktywacji prekursora.

Celem pracy było otrzymanie adsorbentów węglowych z materiału odpadowego jakim jest pelet z wysłódków buraczanych i zastosowanie ich w procesie usuwania ibuprofenu z roztworów wodnych. Adsorbenty otrzymano na drodze aktywacji chemicznej stosując jako czynnik aktywujący węglan potasu. Materiały wyjściowe zaimpregnowano węglanem potasu w stosunku wagowym prekursor : czynnik aktywujący 1:1 oraz 1:2. Następnie otrzymane prekursory poddano aktywacji chemicznej w piecu rurowym. Temperatura aktywacji wynosiła 700°C i 800°C i była prowadzona w atmosferze azotu.

Otrzymane węgle aktywne zostały poddane charakterystyce fizykochemicznej powierzchni. Przeprowadzono również badania adsorpcyjne ibuprofenu z roztworów wodnych.

Badania wykazały, że pelet z wysłódków buraczanych może być wykorzystany jako prekursor adsorbentów węglowych. W przypadku aktywacji chemicznej prekursora węgle aktywne wykazują wysoką efektywność w usuwaniu ibuprofenu z roztworów wodnych. Charakteryzują się także dużą wartością powierzchni właściwej oraz korzystnymi parametrami fizykochemicznymi powierzchni.

Literatura:

- [1] Davarnejad R, i in., (2018) Ibuprofen removal from a medicinal effluent: a review on the various techniques for medicinal effluents treatment. *Environ Technol Innov* 11:308–320. DOI: 10.1016/j.eti.2018.06.011
- [2] Akhil D, i in., (2021) Occurrence and removal of antibiotics from industrial wastewater. *Environ Chem Lett* 19(2):1477–1507. DOI:10.1007/s10311-020-01152-0
- [3] Anand U, i in., (2022) Occurrence, transformation, bioaccumulation, risk and analysis of pharmaceutical and personal care products from wastewater: a review. *Environ Chem Lett* 20(6):3883–3904. DOI: 10.1007/s10311-022-01498-7
- [4] Austin T, I in., (2022) Ibuprofen exposure in Europe; ePiE as an alternative to costly environmental monitoring, *Environmental Research*, Volume 209, 112777, DOI: 10.1016/j.envres.2022.112777.

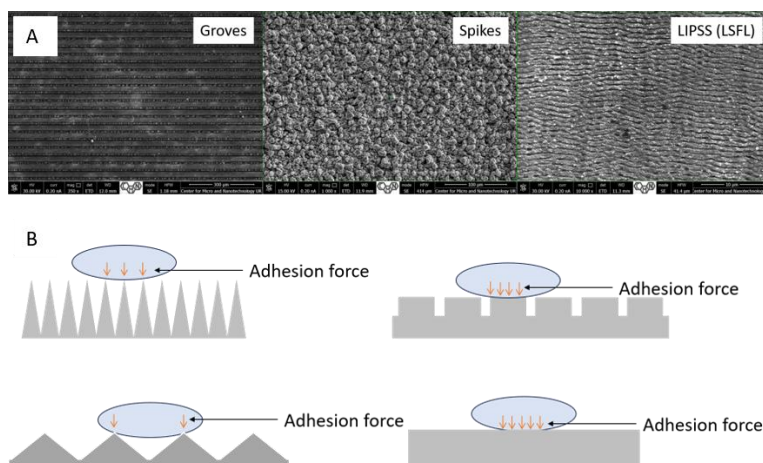
Ultrakrótkie impulsy laserowe w inżynierii powierzchni - struktura, chemia i zastosowania

Joanna Kisała¹, Piotr Krzemiński¹, Renata Wojnarowska-Nowak¹, Bogumił Cieniek¹, Yaroslav Bobitski¹, Małgorzata Kus-Liśkiewicz²

¹Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych, Uniwersytet Rzeszowski; ul. S. Pigonia 1, 35-310 Rzeszów; jkisala@ur.edu.pl

²Wydział Biotechnologii, Uniwersytet Rzeszowski; al. Mjr. W. Kopisto 2A, 35-959 Rzeszów

Laserowa modyfikacja powierzchni umożliwia generowanie złożonych mikro- i nanotekstur (LIPSS, rowki – *ang. grooves*, kolce – *ang. spikes*) (Rysunek 1a) oraz zmianę chropowatości, energii swobodnej powierzchni i składu chemicznego, co bezpośrednio wpływa na adhezję komórek i bakterii (Rysunek 1b) oraz pozwala projektować materiały funkcjonalne do zastosowań elektrochemicznych i biomedycznych. Femtosekundowy laser Yb:KGW zastosowano do teksturyzacji kolektorów prądowych z folii miedzianej dla anod krzemowych w ogniwach Li-ion, uzyskując znaczny wzrost efektywnej powierzchni elektroaktywnej, lepszą adhezję warstwy aktywnej, mechaniczne ograniczenie pęknięcia oraz bardziej równomierny rozkład gęstości prądu, co sprzyja formowaniu stabilnej SEI i wydłuża cykl życia anody. Siatki tytanowe wytworzone metodą impulsowej ablacji laserowej, a następnie modyfikowane przez osadzanie nanocząstek srebra lub utlenianie powierzchni, wykazują poprawioną wydajność fotokatalityczną w oczyszczaniu wody oraz silny potencjał jako skalowalne podłoża SERS dzięki trójwymiarowej, porowatej architekturze sprzyjającej adsorpcji analitu. Z kolei femtosekundowo teksturowane płytki tytanowe, pokryte krystaliczną warstwą TiO_x, działają jako immobilizowany fotokatalizator generujący rodniki hydroksylowe i inne reaktywne formy tlenu przy naświetlaniu UV/UV-A, co przyspiesza degradację zanieczyszczeń organicznych; jednocześnie proces jest szybki, powtarzalny, nie wymaga dodatkowego utleniania ani nanoszenia proszkowego TiO₂, a parametry lasera pozwalają precyzyjnie dostroić morfologię i skład warstwy tlenkowej.



Rysunek 1. Rodzaje tekstur generowanych laserem femtosekundowym (B); Schematyczny diagram oddziaływań komórka-strukturyzowana powierzchnia (B)

1. *Sci Rep* **2026**, 16, 7104. <https://doi.org/10.1038/s41598-026-38369-y>
2. *Sci Rep* **2024**, 14, 20926. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-70103-4>
3. *ACS Appl. Eng. Mater.* **2025**, 3, 3228–3238. <https://doi.org/10.1021/acsaenm.5c00589>
4. *Appl. Sci.* **2025**, 15, 11579. <https://doi.org/10.3390/app152111579>
5. *Materials* **2021**, 14, 5556. <https://doi.org/10.3390/ma14195556>



S04 KS08

Wpływ parametrów spiekania laserowego na przewodnictwo elektryczne powłok opartych na nanocząstkach Ni@Ag o strukturze rdzeń–powłoka

Anna Pajor-Świerzy¹, Paweł Kozieł², Robert Dziedzic², Małgorzata Gazińska², Piotr Warszzyński¹, Krzysztof Szczepanowicz¹

¹*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk, ul.*

Niezapominajek 8, 30-239 Kraków;

²*Politechnika Wrocławska, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław;*

anna.pajor-swierzy@ikifp.edu.pl

Elektronika drukowana należy do najszybciej rozwijających się technologii wytwarzania funkcjonalnych układów elektronicznych ze względu na niskie koszty produkcji, skalowalność procesów, kompatybilność z elastycznymi podłożami oraz niewielkie zużycie materiałów [1]. Wśród nanomateriałów przewodzących wykorzystywanych w tej technologii szczególne zainteresowanie budzą nanocząstki srebra (Ag NPs), charakteryzujące się bardzo wysoką przewodnością elektryczną. Ich szerokie zastosowanie ogranicza jednak wysoka cena srebra. Atrakcyjną alternatywę stanowią nanocząstki niklowo-srebrne o strukturze rdzeń–powłoka (Ni@Ag NPs), łączące niski koszt niklu z wysoką przewodnością elektryczną i zwiększoną odpornością na utlenianie, zapewnianymi przez srebrną powłokę [2]. Uzyskanie przewodzących struktur z tuszów zawierających nanocząstki metali wymaga zastosowania po ich naniesieniu dodatkowego etapu spiekania, który prowadzi do usunięcia składników organicznych formulacji oraz tworzenia połączeń międzycząstkowych, umożliwiających powstanie ciągłych ścieżek przewodzących. Konwencjonalne spiekanie termiczne często wymaga stosowania podwyższonej temperatury i długiego czasu obróbki, co ogranicza możliwość wykorzystania podłoży wrażliwych termicznie. Alternatywę stanowi spiekanie laserowe, umożliwiające szybkie, lokalne i selektywne dostarczanie energii do warstwy nanocząstek przy ograniczonym nagrzewaniu podłoża.

Celem pracy było określenie wpływu parametrów spiekania laserem pracującym w trybie ciągłym, m.in. długości fali i mocy promieniowania oraz prędkości skanowania na morfologię i właściwości elektryczne powłok Ni@Ag osadzonych na podłożach szklanych. Wyniki pomiarów rezystywności skorelowano z obserwacjami przeprowadzonymi za pomocą skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), co pozwoliło określić warunki procesu sprzyjające tworzeniu mostków pomiędzy nanocząstkami oraz powstawaniu ciągłych ścieżek przewodzących.

Wykazano, że długość fali promieniowania laserowego jest jednym z kluczowych parametrów decydujących o efektywności spiekania. Najwyższą przewodność elektryczną uzyskano przy zastosowaniu promieniowania o długości fali 532 nm, co powiązano z efektywniejszym tworzeniem połączeń międzycząstkowych i zagęszczeniem sieci nanocząstek. W zoptymalizowanych warunkach otrzymano powłoki o minimalnej rezystywności wynoszącej 5,45 $\mu\Omega\cdot\text{cm}$, co odpowiada około 29% przewodności elektrycznej litego srebra. Uzyskane wyniki potwierdzają przydatność spiekania laserowego CW do wytwarzania wysoko przewodzących powłok Ni@Ag oraz dostarczają praktycznych wytycznych dotyczących optymalizacji procesu ich otrzymywania z myślą o zastosowaniach w elektronice drukowanej.

Podziękowania:

Badania finansowane z działalności statutowej IKiFP PAN.

Literatura:

1. Kamyshtny, A.; Magdassi S. *Chemical Society Reviews* 2019, **48**, 1712–1740.
2. Pajor-Świerzy, A.; Szczepanowicz, K.; Kamyshtny, A.; Magdassi, S. *Advances in Colloid and Interface Science* 2022, **299**, 102578.

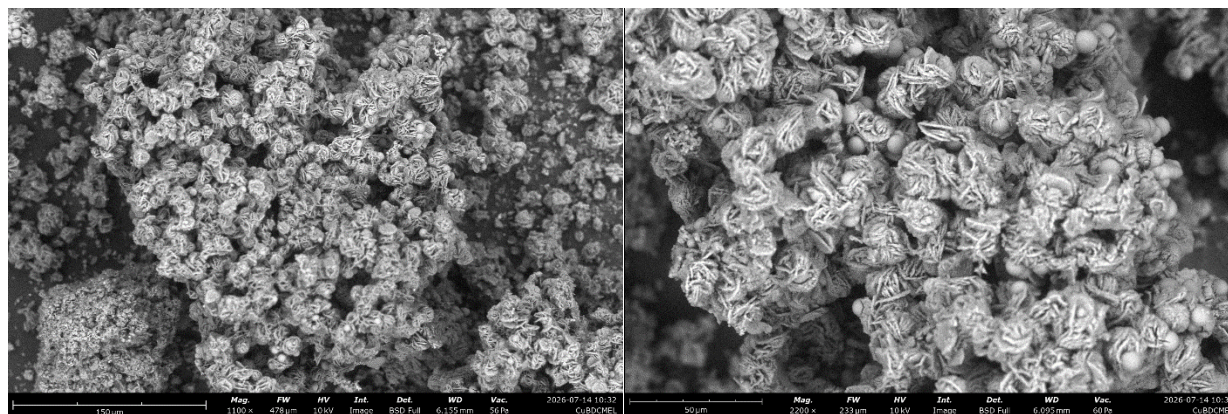
MOF z centrami kobaltu(II) w kolorymetrycznym wykrywaniu L-cysteiny

Paulina Miklaszewska¹, Marzena Jamrógiewicz², Ewa Wagner-Wysiecka^{1,3}

¹Katedra Chemii i Technologii Materiałów Funkcjonalnych, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk; ²Katedra i Zakład Chemii Fizycznej, Wydział Farmaceutyczny, Gdański Uniwersytet Medyczny, al. Gen. Hallera 107, 80-416 Gdańsk; ³Centrum Materiałów Przyszłości, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk;
email: paulina.miklaszewska@pg.edu.pl

Cysteina jest jednym z aminokwasów zaliczanych do grupy aminokwasów siarkowych (razem z metioniną oraz homocysteiną). Jest to związek endogeny, który bierze udział m.in. w syntezie białek, katalizie biologicznej oraz modyfikacjach post-translacyjnych [1]. Zaburzony poziom cysteiny w organizmie, może prowadzić do wielu problemów zdrowotnych, takich jak uszkodzenia wątroby [2, 3], choroba Parkinsona, choroba Alzheimera czy reumatoidalne zapalenie stawów [3]. Jednocześnie cysteina jest często wykorzystywana w technologii żywności w celu zapobiegania ciemnieniu żywności, a także jako dodatek do mąki [4]. Mając na uwadze powszechność cysteiny w pożywieniu, a także konsekwencje wynikające z nieprawidłowego poziomu tego związku w organizmie, istnieją potrzeby opracowywania czułych metod jej wykrywania oraz oznaczania.

Celem prowadzonych badań jest synteza funkcjonalizowanego szkieletu metaloorganicznego (MOF) zawierającego centra metaliczne kobaltu(II), przedstawionego na Rys. 1, a także wykazanie zastosowania tego materiału do wykrywania i oznaczania L-cysteiny metodą kolorymetryczną.



Rys. 1 Obrazy SEM przedstawiające morfologię funkcjonalizowanego MOF z centrami kobaltu(II).

Wstępne badania wykazały zmianę barwy otrzymanego materiału w obecności L-cysteiny i homocysteiny. Analogicznej odpowiedzi nie obserwowano w obecności glutationu. Uzyskane wyniki wskazują na możliwość wykorzystania otrzymanego MOF do kolorymetrycznego wykrywania wybranych aminokwasów tiolowych.

[1] Xie J.H., Han M.Y., Meng L., Li N.B., Xue P., Luo H.Q.: *A highly efficient turn-on fluorescent probe for the rapid and sensitive detection of cysteine*. Sensors and Actuators B: Chemical, 2026, 448(2), 138986

[2] Xiang X., Li Q., Wan J., Chen C., Guo M., He Z., Wang D., Zhao X., Xu L.: *The role of amino acid metabolism in autoimmune hepatitis*. Biomedicine & Pharmacotherapy, 2024, 173, 116452

[3] Zou X., Zhao Y., Lin W.: *Photoacoustic/fluorescence dual-modality cyanine-based probe for real-time imaging of endogenous cysteine and in situ diagnosis of cervical cancer in vivo*. Analytica Chimica Acta, 2023, 1239, 340713

[4] Zhou M., Liu C., Lin Y., Bai T., Ye T., Qian Z., Li L., Guo L., Liu H. Wang J.: *Novel near-infrared fluorescent probe with large Stokes shift for detection of cysteine in food sample and living cells*. Food Chemistry, 2025, 464(2), 141755

Sieci metalo-organiczne inkorporujące aniony heksacyjanochromianowe jako fotoluminescencyjne sensory wilgotności względnej i temperatury

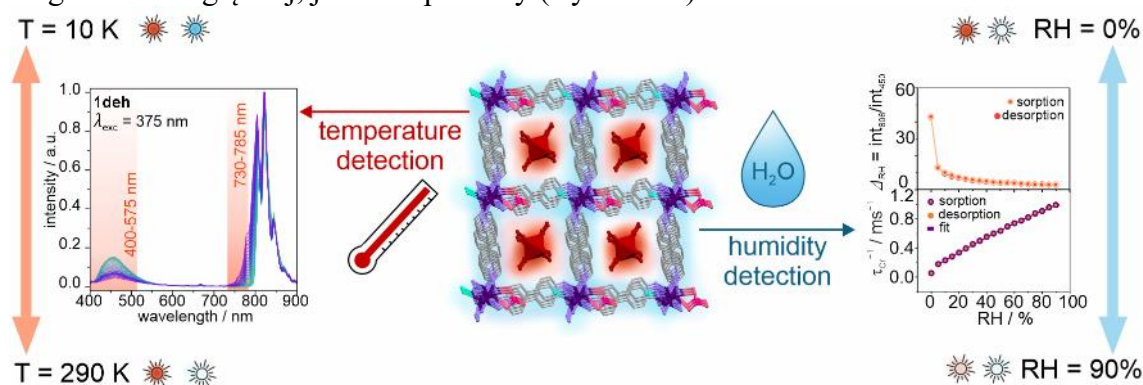
Marta Niemiec, Jakub J. Zakrzewski, Mateusz Reczyński, Szymon Chorąży

Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński;
Gronostajowa 2, 30-387, Kraków;
marta.niemiec@doctoral.uj.edu.pl

W ostatnich latach fotoluminescencyjne sieci metalo-organiczne (PL-MOF) okazały się być doskonałą platformą do optycznego wykrywania zarówno czynników fizycznych (temperatura, ciśnienie), jak i chemicznych (cząsteczki rozpuszczalników, jony).^{1,2} W literaturze opisano wiele przykładów wydajnych sensorów opartych na materiałach typu PL-MOF, jednak tylko nieliczne z tych materiałów umożliwiają jednoczesne wykrywanie wilgotności względnej jak i temperatury.

W tym kontekście prezentujemy serię sieci metalo-organicznych opartych na trzech molekularnych blokach budulcowych: jonach metali bloku s (Sr^{2+} , Ba^{2+}), łączniku organicznym 4,4'-bpdo (tj. N,N'-ditlenek 4,4'-bipirydyny), a także anionach heksacyjanometalanowych $[\text{M}^{\text{III}}(\text{CN})_6]^{3-}$ ($\text{M}^{\text{III}} = \text{Cr}^{\text{III}}$, Co^{III}).³ Wszystkie otrzymane materiały wykazują fotoluminescencję pochodzącą od łącznika 4,4'-bpdo, natomiast te oparte na anionach $[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{CN})_6]^{3-}$ dodatkowo charakteryzują się emisją typu *spin-flip* pochodzącą od przejść elektronowych d-d tego kompleksu.

Na szczególną uwagę zasługuje trwały na powietrzu materiał **1a**, $[\text{Sr}^{\text{II}}(4,4'\text{-bpdo})_{2.5}(\text{NO}_3)]\text{-}[\text{Sr}^{\text{II}}(4,4'\text{-bpdo})_{2.5}(\text{H}_2\text{O})][\text{Cr}^{\text{III}}(\text{CN})_6]\cdot n(\text{H}_2\text{O})$, który wykazuje w pełni odwracalną sorpcję par wody. Sorpcja ta silnie wpływa na efektywność emisji *spin-flip* związanej z centrami $[\text{Cr}^{\text{III}}(\text{CN})_6]^{3-}$, co pozwala na zastosowanie związku **1a** jako fotoluminescencyjnego sensora wilgotności względnej z odczytem optycznym opartym zarówno na racjometrycznym parametrze, jak i na czasie życia emisji *spin-flip*. Dodatkowo pokazano, że całkowicie odwodnioną fazę materiału **1a** (**1deh**) można wykorzystać jako racjometryczny termometr luminescencyjny. Otrzymany materiał stanowi zatem wyjątkowy przykład wielofunkcyjnego sensora luminescencyjnego, umożliwiającego pomiar zarówno wilgotności względnej, jak i temperatury (Rysunek 1).



Rysunek 1. Reprezentatywny fragment struktury krystalicznej związku **1a** ze schematycznym zaznaczeniem dwóch źródeł fotoluminescencji (środek); widma emisji zależne od temperatury dla odwodnionej fazy **1deh** (po lewej), a także parametry wybrane do optycznego wykrywania wilgotności względnej (po prawej).

- [1] Y. Zhang, S. Yuan, G. Day, X. Wang, X. Yang, H. C. Zhou, *Coord. Chem. Rev.* **2018**, 354, 28.
[2] M. Huangfu, M. Wang, C. Lin, J. Wang, *Dalton Trans.* **2021**, 50, 10, 3429.
[3] M. Niemiec, J. J. Zakrzewski, M. Reczyński, S. Chorąży, *Adv. Optical Mater.* **2025**, 2403564.

Indukowana światłem synteza ultragrubych powłok ze szczotek polimerowych o ulepszonych właściwościach przeciwmgielnych

Pola Pawlikowska,^a Karolina Osińska,^a Sumaira Mari Baloch,^a Kamil Awsiuk,^b Paweł W. Majewski,^a Piotr Mocny^a

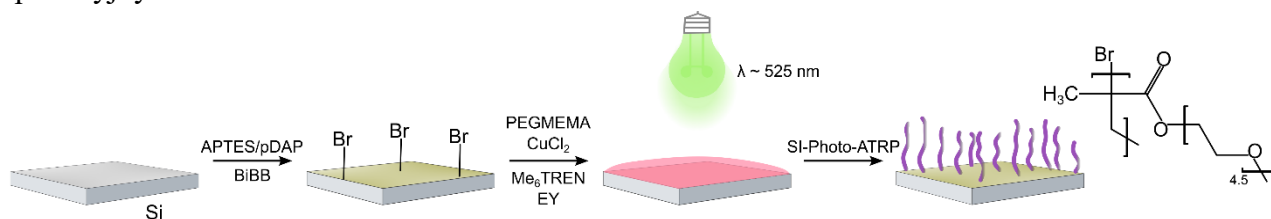
^a Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Pasteura 1, 02-093 Warszawa;
p.pawlikowsk@student.uw.edu.pl;

^b Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Uniwersytet Jagielloński
Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego, Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków;

Szczotki polimerowe to cienkie powłoki zbudowane z łańcuchów polimerowych gęsto przytwierdzonych jednym końcem do podłoża. Dzięki swoim właściwościom znajdują zastosowanie jako warstwy chroniące powierzchnie przed adsorpcją zanieczyszczeń, zużyciem, zaparowywaniem oraz oblodzeniem. Najczęściej otrzymuje się je metodami inicjowanej powierzchniowo kontrolowanej polimeryzacji rodnikowej (SI-CRP), takimi jak SI-ATRP czy SI-RAFT. Mimo prostoty tych metod uzyskanie powłok o dużej grubości (>300 nm) pozostaje wyzwaniem ze względu na terminację propagujących się łańcuchów oraz ograniczone stężenie inicjatorów unieruchomionych na powierzchni.

W ostatnich latach fotoindukowane metody polimeryzacji, takie jak SI-photoATRP oraz fotoindukowana SI-RAFT, stały się obiecującym narzędziem syntezy szczotek polimerowych dzięki wysokiej tolerancji na tlen oraz możliwości precyzyjnej kontroli czasowej i przestrzennej procesu. Ponieważ intensywność światła wpływa na stężenie aktywnych centrów polimeryzacji, umożliwia ona regulację szybkości propagacji i terminacji, a tym samym kontrolę wzrostu szczotek.

W prezentowanej pracy przedstawiamy prostą metodę syntezy ultragrubych szczotek polimerowych o kontrolowanej grubości, sięgającej nawet 800 nm. Połączenie wydajnej fotoindukowanej inicjacji z efektywną funkcjonalizacją powierzchni umożliwiło otrzymanie powłok na różnych podłożach, w tym na szkle, krzemie, stali nierdzewnej i tworzywach sztucznych. Wykazano zależność właściwości przeciwmgielnych od grubości szczotek oraz zademonstrowano możliwość ich syntezy z kontrolowanym wzorem przestrzennym w warunkach otwartego powietrza. Opracowana metoda stanowi uniwersalną strategię modyfikacji powierzchni o wysokim potencjale aplikacyjnym.



Rys. 1. Synteza szczotek polimerowych metodą ATRP inicjowaną zielonym światłem z tolerancją na obecność tlenu.

Podziękowanie: Badania prowadzone dzięki grantom Narodowego Centrum Nauki (NCN) Sonata Bis 10, numer grantu UMO-2020/38/E/ST5/00328 i OPUS 27, numer grantu UMO-2024/53/B/ST5/04316.

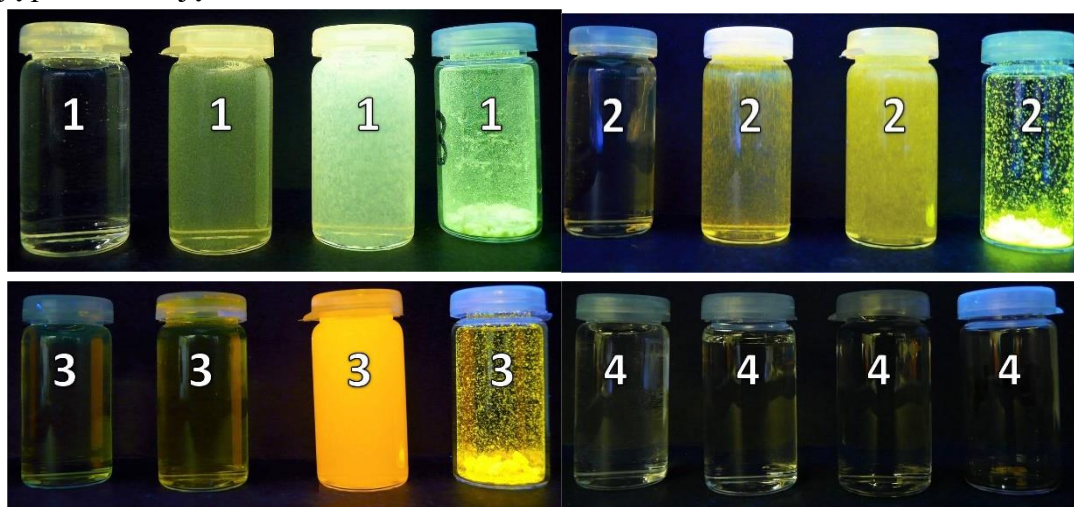
Cząsteczki typu donor-akceptor wykazujące zjawisko wzmocnienia emisji poprzez agregację; synteza, właściwości fizykochemiczne i zastosowania (w technologii OLED i kryminalistyce)

Michał Filapek, Patrycja Filipek

Uniwersytet Śląski w Katowicach, ul. Bankowa 12, 40-007;

michal.filapek@us.edu.pl

Trudno jest sobie wyobrazić utrzymanie obecnego komfortu życia bez najnowszych zdobyczy technologii optoelektronicznych (telewizorów, tabletów czy smartfonów). Z drugiej strony niezbędne staje się stosowanie coraz bardziej ekologicznych, przyjaznych środowisku metod syntezy (wytwarzania) komponentów stosowanych w tychże technologiach. Oznacza to ciągłą konieczność poszukiwania bardziej wydajnych i trwalszych materiałów uzyskiwanych w oparciu o mniej kosztochłonne i bardziej zielone metody syntezy. Jak powszechnie wiadomo, zazwyczaj związki organiczne emitują światło znacznie słabiej w formie ciała stałego niż w roztworach. Dlatego szczególnie cenne są pochodne wykazujących zjawisko wzmocnionej emisji w ciele stałym – czyli po zagregowaniu (od ang. aggregation-induced emission - AIE). Samo zjawisko AIE najlepiej obrazują poniższe zdjęcia:



Zdjęcia ukazujące zjawisko AIE dla związków zsyntezowanych i przebadanych w ramach referowanych badań. Fotografie wykonane zostały w ciemni podczas naświetlania światłem o długości 366 nm.

Powyżej pokazano 4 różne substancje rozpuszczone w (licząc od lewej): THF-ie, mieszaninie THF/woda 1:9 i mieszaninie THF: woda 1:99 (uzyskując roztwory tych samych stężeń). W ostatniej, czwartej od lewej fiolce znajduje się związek w formie ciała stałego. Wzrost zawartości wody wymusza na cząsteczkach agregację, co w przypadku substancji od 1 do 3 powoduje wzrost intensywności "świecenia" - występuje zjawisko AIE, natomiast dla substancji 4 nie obserwuje się zmian - zjawisko nie występuje. Jak łatwo się domyśleć, zjawisko AIE ma szereg zastosowań. Z punktu widzenia niniejszego referatu kluczowe są ich zastosowania jako warstwa emisyjny w diodach OLED, oraz do wizualizacji utajonych śladów linii papilarnych. Zatem, głównym celem badań było wyznaczenie wpływu budowy pojedynczej cząsteczki na „obserwowane” właściwości fizykochemiczne. Szczególnie dużą wagę przywiązano do wyjaśnienia wpływu oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych na te parametry. Ze względu na potencjalne zastosowania badanych molekuł główne techniki analityczne obejmowały spektroskopię absorpcyjną w zakresie UV-VIS, fluorymetrię i elektrochemię.



S04 KS13

Wpływ modyfikacji strukturalnych wybranych pochodnych imidów na ich właściwości fizykochemiczne oraz możliwości zastosowania jako emitery TADF

Patrycja Filipek, Sławomir Kula, Stanisław Krompiec, Agata Szłapa-Kula, Michał Filapek

Uniwersytet Śląski w Katowicach; Instytut Chemii, ul Szkolna 9, 40-006 Katowice;
patrycja.filipek@us.edu.pl

Emitery TADF (Thermally Activated Delayed Fluorescence – termicznie aktywowana opóźniona fluorescencja) są uważane za konkurencyjne materiały elektroluminescencyjne trzeciej generacji, obok materiałów fluorescencyjnych pierwszej i fosforescencyjnych drugiej generacji. Wynika to z faktu, że technologia TADF wprowadziła alternatywny sposób wykorzystania wewnętrznej wydajności kwantowej (IQE) wynoszącej 100% poprzez ścieżkę odwrotnego skrzyżowania międzysystemowego (RISC) związaną ze stanami wzbudzonymi trypletem (T_1) i singletem (S_1). W efekcie diody OLED (organic light-emitting diodes – organiczne diody elektroluminescencyjne) oparte na TADF wykazują wysoką zewnętrzną wydajność kwantową (EQE) oraz dużą stabilność światła [1,2]. Dla zielonych i niebieskich emiterów TADF osiągnięto już dobrą zewnętrzną wydajność kwantową wynoszącą nawet 30%. Postępu takiego nie odnotowano jednak dla czerwonych diod TADF. Wynika to z wysokiego prawdopodobieństwa procesu przejścia nieradiacyjnego oraz efektu wygaszania [3]. W związku z powyższym poszukiwanie tanich, wydajnych oraz stabilnych czerwonych emiterów TADF, których budowa oraz właściwości fizykochemiczne umożliwią rozwiązanie obecnych problemów jest niezwykle istotne. Przykładem grupy związków, które wykazują korzystne właściwości fizykochemiczne w rozważanym temacie badawczym są pochodne imidów. Ugrupowanie imidowe oraz dwie grupy karbonyłowe nadają unikalną cechę w postaci sztywnej i płaskiej struktury sprzężonej. To z kolei umożliwia zaprojektowanie nowych cząsteczek o architekturze donor-akceptor (D-A), która bardzo dobrze sprawdza się podczas projektowania wydajnych pomarańczowo-czerwonych emiterów TADF [4].

W związku z powyższym celem badań było zaprojektowanie, otrzymanie, a także szczegółowe określenie podstawowych właściwości fizykochemicznych determinujących możliwości zastosowania jako emiterów TADF wybranych pochodnych imidów. Badania rozpoczęto od dimeryzacji 1,9-antracenoimidu do dibenzoperylenebisimidu (DBPDI), za pośrednictwem klasycznej syntezy oraz metod elektrochemicznych. Następnie uzyskany DBPDI poddano dalszej funkcjonalizacji, tj. pi-ekspansji przy użyciu strategii APEX, poprzez DAC i domino DAC-CI acetylenów i butadiynów do obszaru zatoki. Dzięki temu otrzymano szereg pochodnych imidów o pi-rozszerzonej strukturze. Wszystkie zsyntezowane związki oczyszczono, a ich budowę potwierdzono za pomocą NMR oraz MS. W kolejnym kroku dla otrzymanych pochodnych przeprowadzono szczegółowe badania fizykochemiczne (termiczne, elektrochemiczne oraz optyczne). Uzyskane wyniki potwierdziły wysoki potencjał rozważanych pochodnych imidów w emiterach TADF. Ponadto umożliwiły wyznaczenie podstawowych zależności pomiędzy strukturą związków, a ich właściwościami.

[1] Braveenth, R., et al. **2021**, *Adv. Funct. Mater.*, 31(47), 2105805.

[2] Zhang, T., et al., **2023**, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 62(39), e202301896.

[3] Kim, J. H., et al, **2018**, *Adv. Opt. Mater.*, 6(18), 1800255.

[4] Zeng, W., et al. **2018**, *Adv. Mater.*, 30(5), 1704961.



S04 KS14

Zagęszczacze reologiczne na bazie amfifilowych bezizocyjanianowych poliuretanów: zrównoważona synteza, samoorganizacja w roztworze wodnym oraz zależności między strukturą a właściwościami

Dominik Wołosz

Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, Warszawa, Polska

dominik.wolosz@pw.edu.pl

Znane w literaturze zagęszczacze reologiczne są otrzymywane na bazie hydrofobowo modyfikowanych etoksylogowanych poliuretanów lub ich bardziej zrównoważonych zamienników – poli(hidroksy-uretanów). Odpowiednio stężone roztwory wodne tych polimerów znajdują zastosowanie jako modyfikatory właściwości reologicznych wodorozcieńczalnych farb czy powłok. Głównym problemem związanym z ich syntezą jest wykorzystanie toksycznych izocyjanianów oraz amin.

W niniejszym wystąpieniu przedstawiona zostanie nowa koncepcja otrzymywania bezizocyjanianowych amfifilowych poli(etero-uretanów) (IFHPEUR) metodą polikondensacji w stanie stopionym pomiędzy hydrofilowym PEG ($\overline{M}_n = 400\text{--}20000\text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$) a hydrofobowym bis(2-hidroksyetylokarbaminianem) otrzymanym z diaminą tłuszczowej. Rozwiązanie to pozwoliło ograniczyć liczbę etapów syntezy, zużycie energii oraz ilość generowanych odpadów, przy jednoczesnym zachowaniu amfifilowej architektury makrocząsteczek.

Celem badań było określenie wpływu długości segmentów PEG, stopnia hydrofobowej funkcjonalizacji oraz stężenia roztworu wodnego na proces samoorganizacji makrocząsteczek IFHPEUR w wodzie. Po raz pierwszy zwizualizowano mechanizm hierarchicznej samoorganizacji amfifilowych poliuretanów za pomocą kriogenicznej transmisyjnej mikroskopii elektronowej (cryoTEM). Udowodniono, że IFHPEUR samoorganizują się w micelle typu rdzeń-korona, wydłużone struktury „robaczkowate”, pęcherzyki, a także agregaty micelarne. Obecność tych nanostruktur bezpośrednio determinowała właściwości lepkosprężyste bardziej stężonych roztworów wodnych, prowadząc do powstania odwracalnej sieci fizycznej o dominującym charakterze sprężystym oraz wyraźnym rozrzedzaniu ścinaniem.

Uzyskane wyniki udowodniły, że opracowane IFHPEUR stanowią obiecującą grupę zrównoważonych zagęszczaczy reologicznych, łączących przyjazną środowisku metodę syntezy z właściwościami użytkowymi wymaganymi w nowoczesnych formulacjach wodnych. Jednocześnie, ograniczyły zużycie lotnych rozpuszczalników organicznych, a także toksycznych amin, izocyjanianów i fosgenu.

Podziękowanie: Badania zostały dofinansowane przez Radę Naukową Dyscypliny Inżynieria Chemiczna (Politechnika Warszawska) w ramach grantu IChem-2026 504/05097/1020/43.062603 RND ICHEM.7_pb.

Badania zostały dofinansowane przez Radę Naukową Dyscypliny Inżynieria Chemiczna (Politechnika Warszawska) w ramach grantu IChem-2026 504/05097/1020/43.062603 RND ICHEM.7_pb.

Wpływ liczby pierścieni aromatycznych w podstawniku C2 pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu na ich właściwości fizykochemiczne oraz możliwości zastosowania w OLED

Sławomir Kula^a, Agnieszka Krawiec^a, Jaijanarathan Lingagounder^b,
Agata Szłapa-Kula^a, Michał Filapek^a, Karol Erfurt^c, Przemysław Data^{b,d}

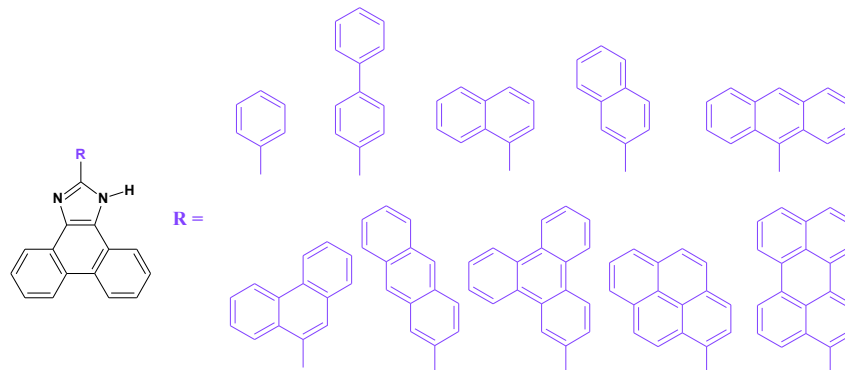
^a Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych, Instytut Chemii,
Szkołna 9, 40-007 Katowice, Polska

^b Politechnika Łódzka, Wydział Chemii, Katedra Fizyki Molekularnej, 90-543 Łódź, Poland

^c Politechnika Śląska, Wydział Chemii, Katedra Technologii Chemicznej oraz Petrochemii, B.
Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice, Poland

^d Durham University, Department of Physics, South Road, Durham DH1 3LE, United Kingdom

Do tej pory w literaturze opisano liczne przykłady pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu badanych pod kątem zastosowania w OLED [1]. W aspekcie strukturalnym rozważane związki różnią się między sobą pod względem podstawników, w szczególności w pozycji C2 [1]. Jednakże, mimo wielu opisanych badań trudno jest jednoznacznie określić jaka grupa podstawników lub jaka ich modyfikacja strukturalna jest najbardziej korzystna z punktu widzenia zastosowania w OLED. Dlatego podjęliśmy próbę stopniowej zmiany podstawników w pozycji C2 w strukturze pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu w celu określenia dynamiki zmiany wybranych właściwości fizykochemicznych (termicznych, elektrochemicznych oraz optycznych). Co więcej, w czasie badań wzięliśmy pod uwagę sposób ułożenia pierścieni aromatycznych oraz pozycje przyłączenia podstawnika do rdzenia cząsteczki. Aby lepiej określić, wpływ pierścieni aromatycznych w pozycji C2 zrezygnowaliśmy z podstawnika w pozycji N1 (pozostawiając tam nie podstawioną grupę N-H). Badania przeprowadzono na dziesięciu pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu (0A - 0J) dla których liczba pierścieni aromatycznych oraz sposób ich ułożenia w podstawniku C2 zmieniał się narastająco (schemat 1). Finalnie, badania elektroluminescencyjne dowiodły, że barwę emisji i wydajność pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu można precyzyjnie dostroić poprzez zmianę podstawnika aromatycznego w pozycji C2. Związki 0E, 0I i 0J łączą korzystne wyrównanie energetyczne, umiarkowanie opóźnioną fluorescencję i silną emisję w stanie stałym, przy czym 0J osiąga EQE = 4,3% oraz luminancję sięgającą 8960 cd·m⁻².



Schemat. 1. Badane pochodne fenantro[9,10-d]imidazolu (0A - 0J)

Literatura:

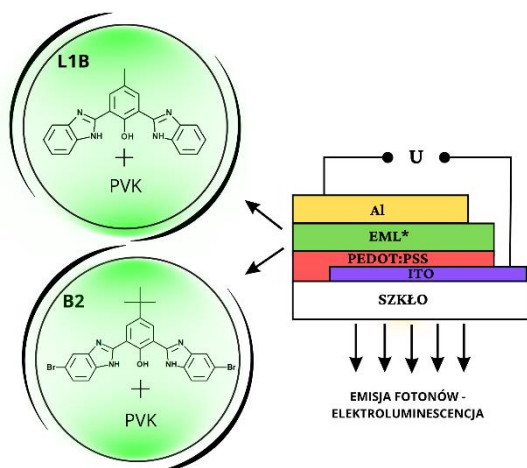
1. Tagare, J.; Vaidyanathan, S. Recent development of phenanthroimidazole-based fluorophores for blue organic light-emitting diodes (OLEDs): an overview. *Journal of Materials Chemistry C*, 2018, 6, 10138–10173. <https://doi.org/10.1039/C8TC03689F>.

Kompleksowe projektowanie związków do zastosowań w urządzeniach optoelektronicznych

Dominika Jankowska, Tadeusz M. Muzioł, Monika Pokładko-Kowar, Ewa Gondek, Paweł Popielarski, Magdalena Barwiołek

*Wydział Chemii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu,
 ul. Jurija Gagarina 7, 87-100 Toruń
 djankowska@umk.pl*

Diody OLED mają kluczowe znaczenie w przemyśle optoelektronicznym. Współcześni badacze nadal dążą do poprawy parametrów świecenia oraz parametrów technicznych diod poprzez optymalizację architektury urządzenia. Wydajność i żywotność diody determinuje warstwa emisyjna (EML), dlatego też modyfikacja jest wysoce istotna. W wyniku modyfikacji struktury związku poprzez wprowadzenie podstawników o różnorodnych właściwościach sterycznych lub elektronowych można w sposób kontrolowany wpływać na cechy strukturalne i optyczne połączeń. Skutkiem tych modyfikacji jest możliwość tworzenia wysokowydajnych urządzeń elektrochemicznych, takich jak OLED-y, ogniwa słoneczne czy czujniki, jak również kontrola parametrów. [1]



W wyniku przeprowadzonych badań otrzymano dwa ligandy makrocykliczne [2+2], dwa ligandy makrocykliczne [3+3], pięć ligandów benzimidazolowych modyfikowanych podstawnikami: -bromo, grupy: fenyłowa, -metylowa, -tert-butyłowa oraz naftoimidazol jak również dwa makrocykliczne kompleksy cynku(II) i dwa makrocykliczne kompleksy miedzi(II). Przeprowadzono charakterystykę spektroskopową i badania właściwości otrzymanych związków w roztworze i w ciele stałym za pomocą metod: NMR, IR, UV-Vis, analizy elementarnej, analizy termicznej, rentgenowskiej analizy strukturalnej, analizy powierzchni Hirshfelda. Określono także właściwości fluorescencyjne

otrzymanych związków w roztworze i ciele stałym w celu kwalifikacji materiałów, jako prekursorów diod OLED bądź czujników fluorescencyjnych. Skonstruowano trzy diody OLED, wykorzystując ligandy benzimidazolowe, które pełnią rolę warstwy emisyjnej powstałego urządzenia optycznego. Wyznaczono parametry diody tj. maksymalną długość fali emisji elektroluminescencji, napięcie początkowe, maksymalną jasność, wydajność prądową oraz grubość warstwy aktywnej. Potwierdzono wysokie parametry świecenia, OLED-B2 wykazuje napięcie początkowe (U_{on}) wynoszące 5,68 V i maksymalną luminancję wynoszącą 401 cd/m², podczas gdy OLED-B3 wykazuje 6,34 V i 504 cd/m². [2] Dodatkowo wykazano że pochodna benzimidazo[1,2-a]chinoliny L1 w roztworze DMSO wykazuje właściwości sensoryczne w stosunku do jonów Zn^{2+} i Mg^{2+} w zakresie stężeń jonów Zn^{2+} C=0,01–14,65 μ M i jonów Mg^{2+} C=0,01–59,43 μ M. [3] Uzyskane wyniki skutkują możliwością zastosowania tak skonstruowanych urządzeń w przemyśle.

Finansowanie: Niniejsze badania zostały sfinansowane przez HE-MCSA-RISE-2022, Sens4Corn, 101086364

[1] Y. Lin, W. Tsai, C. Lu, Chemistry A European J 29 (2023).

[2] D. Jankowska, T.M. Muzioł, M. Pokładko-Kowar, E. Gondek, P. Popielarski, M. Barwiołek, J. Mol. Struct. 1350 (2026) 144092.

[3] D. Jankowska, T. M. Muzioł, D. Mandal, A. Kaczmarek-Kędziera, I. Tepliakova, R. Viter, M. Barwiołek, Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc. 343 (2025) 126604.



S04 KS17

Chemiczne puzzle: modułowe projektowanie struktur oraz właściwości fizykochemicznych nowych pochodnych dibenzofulwenu

Paweł Kalarus, Agata Szłapa-Kula, Michał Filapek, Sławomir Kula

Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych, Instytut Chemii;
ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice;
pawel.kalarus@us.edu.pl

Rosnące zapotrzebowanie na energię elektryczną w budynkach, szczególnie związane z ogrzewaniem i klimatyzacją, stymuluje rozwój technologii poprawiających efektywność energetyczną[1][2]. Jednym z obiecujących rozwiązań są inteligentne okna wykorzystujące materiały elektrochromowe, które pod wpływem przyłożonego napięcia odwracalnie zmieniają właściwości optyczne[3][4], umożliwiając kontrolę przepuszczalności światła i ciepła. Dalszy rozwój tej technologii wymaga projektowania nowych materiałów o wysokiej stabilności oraz precyzyjnie dostrojonych właściwościach fizykochemicznych[1][2][3][4]. Jednym z podejść umożliwiających racjonalne projektowanie takich związków jest strategia modułowa, polegająca na analizie wpływu poszczególnych fragmentów strukturalnych, a następnie ich łączeniu w bardziej złożone układy, w celu określenia efektów synergicznych.

Wobec powyższego, celem badań było otrzymanie, oczyszczenie oraz kompleksowa charakterystyka fizykochemiczna (w szczególności właściwości elektrochemicznych) nowej pochodnej dibenzofulwenu oraz związków stanowiących jej elementy strukturalne. Takie podejście umożliwiło określenie wpływu poszczególnych modułów molekularnych na właściwości końcowego układu. Syntezę przeprowadzono z wykorzystaniem m.in. reakcji sprzęgania Sonogashiry, kondensacji Knoevenagela oraz alkilowania, a otrzymane związki oczyszczono metodami chromatografii kolumnowej oraz krystalizacji. Następnie oceniono ich stabilność termiczną metodą analizy termogravimetrycznej oraz właściwości optyczne na podstawie badań absorpcji i emisji. Właściwości elektrochemiczne scharakteryzowano z wykorzystaniem woltamperometrii cyklicznej i różnicowej woltamperometrii pulsowej, natomiast badania spektroelektrochemiczne pozwoliły wstępnie ocenić, czy rozważane związki wykazują właściwości elektrochromowe.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że modułowe projektowanie umożliwia systematyczne określenie zależności pomiędzy budową chemiczną a właściwościami termicznymi, optycznymi, elektrochemicznymi i elektrochromowymi oraz identyfikację fragmentów strukturalnych odpowiedzialnych za najbardziej korzystne parametry użytkowe. Otrzymana pochodna dibenzofulwenu charakteryzuje się wysoką stabilnością termiczną i elektrochemiczną oraz wykazuje elektrochromizm przy niskich wartościach przyłożonego potencjału, co czyni ją obiecującym kandydatem do zastosowania jako materiał elektrochromowy w inteligentnych oknach.

1. Z. Mei, Adv. Funct. Mater. 2026, 36, e75659.
2. L. Manjakal, Prog. Mater. Sci. 2024, 142, 101244.
3. W. Fang, J. Mater. Chem. C 2024, 12, 17263–17269.
4. P. V. Chavan, Adv. Opt. Mater. 2024, 12, 2302976.



S04 KS18

Wpływ podstawników tiofenowych na właściwości pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu w zastosowaniach optoelektronicznych

Agnieszka Krawiec ^a, Nathan Béghin ^b, Michał Filapek ^a, Claudia Wilfinger ^b, Lionel Rechainat ^c, Karol Erfurt ^d, Cyrille Monnereau ^e, Clement Cabanetos ^b, Maxime Rémond ^b, Sławomir Kula ^a

^a Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych, Instytut Chemii, Szkolna 9, 40-300 Katowice, Polska

^b Univ Angers, CNRS, MOLTECH-ANJOU, SFR MATRIX, Angers, Francja

^c Univ Limoges, XLIM, UMR 7252, Limoges, Francja

^d Katedra Technologii Chemicznej Organicznej i Petrochemii, Wydział Chemii, Politechnika Śląska, Krzywoustego 9, 44-100 Gliwice, Polska

^e ENS de Lyon, CNRS, Laboratoire de Chimie, UMR 5182, Lyon, Francja
agnieszka.krawiec@us.edu.pl

Przez ostatnie lata urządzenia oświetleniowe oparte na technologii półprzewodnikowej (solid-state lightning – SSL) stały się podstawowym źródłem światła, stopniowo zastępując tradycyjne żarówki i świetlówki. Obecnie coraz częściej projektuje się urządzenia energooszczędne, takie jak dobrze znane organiczne diody elektroluminescencyjne (organic light-emitting diode – OLED) czy innowacyjne ogniwa elektrochemiczne emitujące światło (light-emitting electrochemical cell – LEC). Wyświetlacze, monitory czy telewizory bazujące na tych technologiach charakteryzują się bardzo dużym zakresem oraz czystością kolorów, szerokim kątem widzenia, wysokim współczynnikiem kontrastu oraz bardzo szybkim czasem reakcji [1]. Jednak do ich dalszego rozwoju niezbędne są stabilne i wydajne emiterzy światła, które zagwarantują długą żywotność urządzenia.

Tiofen i jego pochodne są popularnymi elementami budulcowymi wielu struktur organicznych stosowanych w elektronice organicznej i fotowoltaice [2]. Czy jednak zastosowanie pierścieni tiofenowych jako podstawników w pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu zmieni ich właściwości na tyle skutecznie, że staną się one wydajnymi emiterami światła? Aby odpowiedzieć na to pytanie, otrzymaliśmy sześć pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu z pierścieniami tiofenowymi w pozycji C2 (podstawnik tiofenowy i 2,2'-bitiofenowy), a wybrane pochodne przetestowaliśmy jako emiterzy w diodach OLED i ogniwach LEC. Diody OLED wykazały maksymalne wartości EQE do 1,6% i emitowały głęboko niebieskie światło, zbliżone do standardu Broadcast Television Service 2020. Natomiast diody LEC wykonane ze związków o charakterze jonowym wykazały słabszą emisję oraz silne przesunięcie elektroluminescencji ku czerwieni. Badania te pozwoliły na wyznaczenie zależności pomiędzy strukturą pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu, a ich właściwościami fizykochemicznymi. Stanowi to podstawę racjonalnego projektowania materiałów emisyjnych nowej generacji, dostosowanych do wymagań nowoczesnych urządzeń elektronicznych.

1. Krawiec, A.; Lingagouder, J.; Szlapa-Kula, A.; Filapek, M.; Erfurt, K.; Data, P.; Kula, S. Effect of Aromatic Ring Number and Substituent Arrangement on the Properties of Phenanthro[9,10-d]Imidazole Derivatives for OLEDs. *Journal of Materials Chemistry C* 2026, doi:10.1039/D6TC00518G.

2. Ahmad Mustamin, K.; Sani Sarjadi, M.; Sarkar, S.M.; Kumar, S.; Rahman, M.L. Optimization of Polymers for Organic Solar Cells: Effects of Alkyl, Fluorinated and Thiophenated Chains. *Chemistry – An Asian Journal* 2025, 20, e202401406, doi:10.1002/asia.202401406.

Nowe dwufunkcyjne imidy *exo-N*-(akilo/arylo-winyleno-silileno)norbornenowe: synteza i zastosowanie w projektowaniu liniowych materiałów polimerowych

Mariusz Majchrzak¹, Izabela Czełusniak², Izabela Godlewska¹, Faustyna Kowalska¹

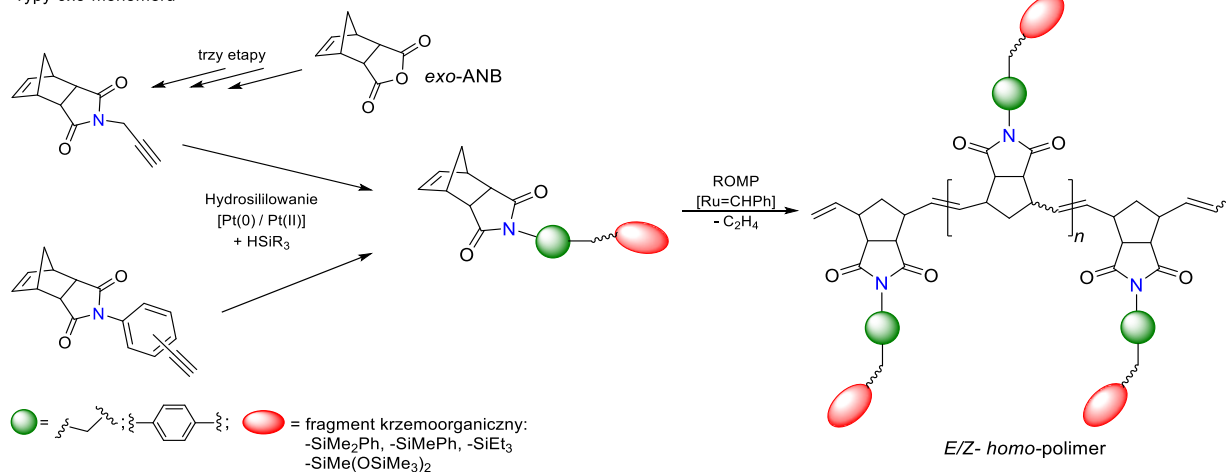
¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań.

²Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław,
 adres korespondencyjny: Wydział Chemii, UAM, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań.
 e-mail: mariusz.majchrzak@amu.edu.pl

Reakcja metatetycznej ‘żyjącej’ polimeryzacji cykloolefin typu ROMP, katalizowana kompleksami alkilidenowymi rutenu(II), należy do użytecznych i efektywnych narzędzi katalitycznych stosowanych we współczesnej chemii organicznej, chemii materiałów polimerowych oraz chemii metaloorganicznej^{1,2}. Przemiana ta, umożliwia syntezę, między innymi liniowych, nienasyconych polimerów, których matryce mogą być rozbudowane o różnorodne grupy funkcyjne^{3,4}. Struktury mieszane takie jak, materiały hybrydowe otrzymywane tą metodą znajdują zastosowanie jako czujniki chemiczne⁵, błony do separacji gazów⁶, materiały elektrochromowe⁷, jak również jako materiały wysoce termo-odporne⁸.

W wykładzie zostaną zaprezentowane procedury syntez, katalityczne metody modyfikacji nowych związków molekularnych pochodnych imido-norbornenu, zawierających organiczne, nienasycone grupy funkcyjne i krzemioorganicznych oraz ich kontrolowana polimeryzacja ROMP (Rys.1). Ponadto, omówione zostaną również ich właściwości chemiczne oraz fizykochemiczne.

Typy *exo*-monomeru



Rysunek 1. Ogólny schemat syntezy materiałów imido-norborneno pochodnych.

Podziękowanie: dla Narodowego Centrum Nauki za wsparcie finansowe w ramach grantu UMO-2024/53/B/ST5/03556.

Literatura

1. E. Khosravi, W.J. Feast, A.A. Al-Hajaji, T. Leejarkpai, *J. Mol. Cat. A: Chem.*, 2000, **160**, 1-11.
2. R.H. Grubbs, E. Khosravi, In *Synthesis of Polymers - a Volume of Materials Science and Technology Series*; Schluter, A.D., Ed.; Wiley-VCH, 1998, p. 63-104.
3. M. Majchrzak, P.J. Hine, E. Khosravi, *Polymer (UK)*, 2012, **53**, 5251-5257.
4. M. Majchrzak, K. Kacprzak, M. Piętka, J. Garbarek, K. Taras-Goślińska, *Polymers*, 2025, **17**, 1661-1674.
5. N. Luisier, R. Scopelliti, K. Severin, *Soft Matter*, 2016, **12**, 588-593.
6. A.I. Wozniak, i inni, *Polym. Chem.*, 2023, **14**, 5274-5285.
7. W. Wen-Ming, L. Shun-Shun, Dong-Ming, L. Xin-Hu, S. Xiao-Li, *Macromolecules*, 2017, **50**, (17), 6872-6879.
8. P. Yang, i inni, *Materials Today Communications*, 2019, **19**, 186-195.



S04 KS20

Synteza i charakterystyka wysoce porowatych materiałów HIPE na bazie polietylenoiminy do adsorpcji zanieczyszczeń z wody

Joanna Szymkowiak, Weronika Buła, Michał Cegłowski

Wydział Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań
joanna.szymkowiak@amu.edu.pl

Rosnąca obecność pestycydów i barwników organicznych w środowisku wodnym stwarza potrzebę opracowania nowych materiałów adsorpcyjnych o wysokiej skuteczności usuwania zanieczyszczeń. W niniejszej prezentacji omówione zostaną wysoce porowate materiały typu HIPE (High Internal Phase Emulsion)^{1,2} na bazie polietylenoiminy (PEI) sieciowanej eterem diglicydydowym 1,4-butanodiolu (BDE).³ Zastosowana metoda syntezy umożliwiła wytworzenie trójwymiarowych struktur o rozwiniętej porowatości i dużej dostępności grup aminowych.

Celem badań było określenie wpływu stopnia usieciowania na właściwości strukturalne i adsorpcyjne materiałów. W tym celu zsyntezowano serię próbek o zróżnicowanej zawartości BDE, a następnie scharakteryzowano ich morfologię oraz parametry porowatości. Wykazano, że ilość zastosowanego środka sieciującego istotnie wpływa na architekturę porów oraz dostępność grup funkcyjnych w strukturze materiału. Zwiększenie stopnia usieciowania prowadziło do zmian w budowie porowatej, co bezpośrednio przekładało się na zdolność adsorpcyjną otrzymanych adsorbentów.

Właściwości użytkowe oceniono w procesach usuwania wybranych pestycydów i barwników z roztworów wodnych. Otrzymane materiały wykazywały wysoką efektywność adsorpcji, wynikającą z synergicznego działania rozwiniętej struktury porowatej oraz obecności licznych grup aminowych PEI. Uzyskane wyniki wskazują, że materiały HIPE na bazie PEI i BDE są obiecującymi kandydatami do zastosowań w technologiach oczyszczania wody.

Autorzy pragną podziękować Komisji Europejskiej oraz Narodowemu Centrum Badań i Rozwoju w Polsce za finansowanie w ramach międzynarodowego konsorcjum WATER-BIOFIL, realizowanego w ramach wspólnego zaproszenia do składania wniosków z 2022 r. w ramach Partnerstwa Europejskiego nr 101060874 – Water4All (WATER4ALL/1/54/WATER-BIOFIL/24).

1. M.S. Silverstein, PolyHIPEs: Recent Advances in Emulsion-Templated Porous Polymers, *Progress in Polymer Science* **2014**, 39(1), 199 – 234.
2. M.S. Silverstein, N.R. Cameron, PolyHIPEs – Porous Polymers from High Internal Phase Emulsions, *Encyclopedia of Polymer Science and Technology*, **2010**.
3. J. Szymkowiak, W. Buła, M. Cegłowski, artykuł w przygotowaniu.

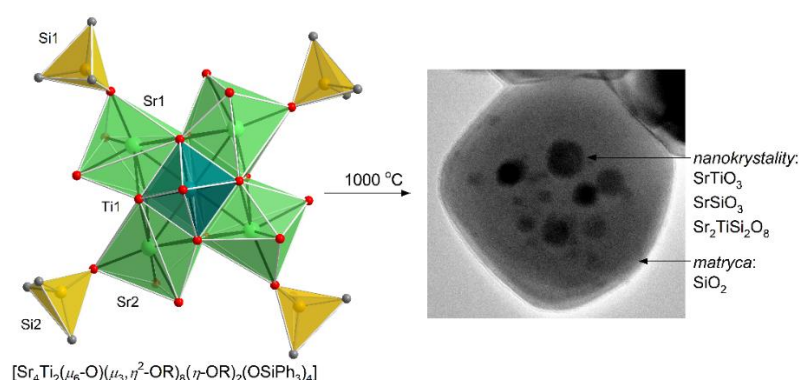
Zastosowanie alkoksylanów metali do wytwarzania ceramicznych i szkloceramicznych matryc do immobilizacji modelowych odpadów promieniotwórczych

Rafał Petrus, Piotr Sobota

Wydział Chemiczny Politechniki Wrocławskiej, Smoluchowskiego 23, 50-370 Wrocław.
 rafal.petrus@pwr.edu.pl

Wykorzystanie reaktorów jądrowych do produkcji energii elektrycznej generuje rocznie około 12 000 ton wypalonego paliwa, którego przetwarzanie w celu odzyskania uranu i plutonu powoduje powstawanie wysoce radioaktywnych odpadów płynnych (HLW). Odpady te zawierają ponad 300 radionuklidów, pochodzących od blisko 50 różnych pierwiastków układu okresowego. W celu ograniczenia ich długotrwałego wpływu na środowisko poddaje się je przekształceniom w stabilne izotopy (transmutacja) lub immobilizacji w strukturze chemicznie trwałych i odpornych na uszkodzenia radiacyjne materiałów, takich jak szkła, ceramiki czy szkło-ceramiki.

Głównym celem prezentowanych badań jest opracowanie nowych, efektywnych i wysoce wydajnych metod immobilizacji odpadów radioaktywnych poprzez ich wbudowanie i unieruchomienie w skali atomowej w matrycach krystalicznych. W tym celu, wzorując się na występujących w naturze minerałach, takich jak perowskit CaTiO_3 , cyrkonolit $\text{CaZrTi}_2\text{O}_7$, kalcyryt $\text{Ca}_2\text{Zr}_5\text{Ti}_2\text{O}_{16}$, marokit CaMn_2O_4 czy tausonit SrTiO_3 , zaprojektowano heterometaliczne prekursor molekularne do wytwarzania matryc immobilizujących modelowe odpady radioaktywne. Kompleksy zbudowane z dwóch różnych jonów metali oraz dodatkowych ligandów zawierających atomy B, Si lub P tworzą zdefiniowany na poziomie molekularnym motyw $\text{M}-\text{O}-\text{M}'$ lub $\text{M}-\text{O}-\text{M}'-\text{O}-\text{B}(\text{Si}, \text{P})$, który po usunięciu lotnych związków organicznych przekształca się w materiał docelowej matrycy, jak przedstawiono na Rysunku 1.¹⁻³ Badania laboratoryjne HLW są niemożliwe do przeprowadzenia ze względu na ich wysoką radioaktywność, dlatego jony lantanowców ($\text{Ln}^{\text{III/IV}}$) stosowane są jako mimetyki transuranowców (Am^{III} , Cm^{III} , Pu^{IV} lub Np^{IV}).



Rys. 1. Synteza matrycy $\{\text{SrTiO}_3/\text{SrSiO}_3/\text{SrTiSi}_2\text{O}_8\}@\text{SiO}_2$ do immobilizacji modelowych odpadów radioaktywnych.

Podziękowania: Badania sfinansowano ze środków NCN w ramach projektu o nr 2023/49/B/ST4/04068.

1. A. Drąg-Jarząbek, R. Petrus, P. Sobota, Inorg. Chem., 2016, 55, 9524.
2. R. Petrus, K. Chomiak, J. Utko, A. Bieńko, T. Lis, P. Sobota, Inorg. Chem., 2020, 59, 16545.
3. R. Petrus, A. Kowaliński, T. Lis, M. Siczek, P. Sobota, Inorg. Chem., 2025, 64, 16020.

Remediacja gleb skażonych. Nawóz organiczno-mineralny, biowęgiel i wermiremediacja w glebach alkalicznych

Sławomir Kaczmarek¹, Iwona Kupich², Małgorzata Kacprzak³, Robert Wolski¹, Robert Pietrzak¹

¹ Uniwersytet im Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii,

² Politechnika Częstochowska, Wydział Infrastruktury i Środowiska

³ Politechnika Warszawska, Wydział Inżynierii Lądowej, Mechaniki i Petrochemii

slakac1@amu.edu.pl

Zanieczyszczenie gleb produktami ropopochodnymi pozostaje istotnym problemem środowiskowym, szczególnie w glebach ilastych o silnie zasadowym odczynie (pH 8,0–8,6), gdzie silna adsorpcja węglowodorów na powierzchniach mineralnych ogranicza ich biodostępność i skuteczność naturalnej biodegradacji. Niniejsze badanie porównało trzy strategie bioremediacji: (i) nawóz organiczno-mineralny wytworzony z osadu ściekowego, tlenku magnezu i kwasu siarkowego(VI), (ii) biowęgiel z pirolizy biomasy oraz (iii) wermiremediację z zastosowaniem mieszaniny *Eisenia fetida*/E. andrei. Doświadczenie prowadzono przez sześć miesięcy na dwóch glebach pobranych z terenu skażonego wskutek awarii ropociągu (województwo kujawsko-pomorskie), monitorując zawartość całkowitych węglowodorów ropopochodnych (TPH), wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych (WWA), aktywność dehydrogenazową (DHA), status odżywczy, pseudo-całkowite stężenia metali oraz odpowiedzi mikrobiologiczne gleby.

Spośród badanych wariantów nawóz organiczno-mineralny wykazał najbardziej wszechstronną skuteczność remediacyjną, redukując TPH o do 64% i WWA o do 59%, jednocześnie zwiększając aktywność mikrobiologiczną, poprawiając biodostępność składników odżywczych i neutralizując odczyn gleby (spadek pH z ~8,6 do ~7,1–7,4). Efekt ten przypisano synergii wzbogacenia w azot, fosfor i siarkę oraz stymulacji mikroorganizmów degradujących węglowodory w warunkach zbliżonych do obojętnych. Biowęgiel okazał się mniej skuteczny w degradacji węglowodorów (redukcja TPH 32–47%) ze względu na własną alkaliczność (pH ≈9,5), hamującą aktywność mikrobiologiczną w już zasadowej glebie, lecz wykazał wyraźny potencjał w zakresie redystrybucji metali ciężkich oraz stabilizacji węgla organicznego dzięki wysokiej powierzchni właściwej (BET 350 m²/g) i pojemności wymiany kationów. Wermiremediacja poprawiła aktywność dehydrogenazową i obieg składników odżywczych (N, P, K), jednak jej skuteczność w usuwaniu węglowodorów była zmienna i zależna od porowatości gleby (TPH: 46,8–64,4%).

Analizy wielowymiarowe (PCA, hierarchiczna analiza skupień, korelacje Pearsona) potwierdziły odrębność mechanizmów działania poszczególnych wariantów: nawóz organiczno-mineralny wykazał zintegrowaną synergię chemiczno-biologiczną, biowęgiel działał głównie poprzez stabilizację geochemiczną, a dżdżownice poprzez biostrukturyzację gleby. Silna ujemna korelacja między DHA a TPH ($r = -0,91$) oraz między DHA a pH ($r = -0,79$) potwierdza kluczową rolę neutralizacji odczynu i stymulacji mikrobiologicznej w skutecznej degradacji zanieczyszczeń.

Wyniki wskazują, że ponowne wykorzystanie osadów ściekowych do produkcji nawozów organiczno-mineralnych stanowi obiecującą, zgodną z założeniami gospodarki o obiegu zamkniętym strategię remediacji zasadowych gleb ropopochodnie zanieczyszczonych. Wnioski ograniczają się jednak do warunków sześciomiesięcznej inkubacji laboratoryjnej — konieczna jest walidacja w skali polowej oraz dalsza optymalizacja podejść zintegrowanych, łączących mechanizmy chemiczne, biologiczne i fizyczne.

Słowa kluczowe: bioremediacja, węglowodory ropopochodne, osad ściekowy, nawóz organiczno-mineralny, biowęgiel, *Eisenia fetida*, gospodarka o obiegu zamkniętym

Aktywowany ditlenkiem węgla popiół ze spalania ciężkich frakcji ropy naftowej jako adsorbent bisfenolu A z fazy wodnej

Witold Krumplewski, Dorota Paluch, Robert Wolski, Robert Pietrzak

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej,
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań,
witkru@st.amu.edu.pl

Popiół, powstający podczas spalania ciężkich frakcji ropy naftowej (*ang. heavy oil fly ash - HOFA*), jest niebezpiecznym odpadem przemysłowym. Wytwarza się go na całym świecie w milionach ton m.in.: w rafineriach, elektrowniach oraz zakładach odsalania wody. Oprócz węgla, który jest głównym jego składnikiem (ok. 85%), zawiera również pierwiastki metaliczne: V, Ni, Fe, Zn, Co, Cu, Cr, Cd, Sn, Pb, Mn i As. Popiół, składowany na wysypiskach, powoduje w rezultacie zanieczyszczenie środowiska metalami ciężkimi. Zatem z punktu widzenia ochrony środowiska bardzo ważne są badania mające na celu opracowania metod jego przetwarzania i praktycznego zastosowania w technologiach przemysłowych. Z uwagi na dużą zawartość węgla pierwiastkowego, z popiołu HOFA można otrzymać węgiel aktywny, m.in. w procesie wysokotemperaturowej aktywacji fizycznej ditlenkiem węgla lub parą wodną¹.

W przeprowadzonych badaniach sprawdzono możliwość wykorzystania aktywowanego fizycznie HOFA jako adsorbenta bisfenolu A (BPA). BPA jest syntetyczną substancją organiczną stosowaną głównie jako monomer do syntezy materiałów polimerowych, które są składnikami powłok ochronnych metalowych puszek i nakrętek butelek przeznaczonych do kontaktu z żywnością. BPA może zaburzać: produkcję, funkcjonowanie i aktywność hormonów endogennych, powodując nieprawidłowości w pracy przysadki mózgowej. BPA, obecny w ściekach przemysłowych i komunalnych, stanowi zatem poważne zanieczyszczenie środowiskowe, ponieważ tradycyjne oczyszczalnie ścieków nie radzą sobie w pełni z jego eliminacją.

Wyflukany w kwaśnym środowisku w temperaturze pokojowej, popiół HOFA poddawano procesowi aktywacji fizycznej. Procesy aktywacji fizycznej przeprowadzano ditlenkiem węgla w piecu rurowym w temperaturze 900°C i 1000°C w czasie 2h i 3h z narostem temperatury 10°C/min i szybkością przepływu CO₂ 250 mL/min. Otrzymano adsorbenty węglowe o powierzchni właściwej BET od 62 do 250 m²/g. Maksymalne pojemności sorpcyjne bisfenolu A, wyznaczone na podstawie izoterm w temperaturze 20°C, wynosiły od 30 do 83 mg/g. Adsorpcję BPA, z fazą sorpcyjną w postaci aktywowanego HOFA, najlepiej opisuje model izotermi Langmuira oraz kinetyczny model pseudo-drugorzędowy. Skuteczność adsorpcji BPA z fazy wodnej maleje wraz ze wzrostem temperatury oraz w środowisku zasadowym powyżej pH=9. Proces adsorpcji na sorbencie, o największej powierzchni właściwej równej 250 m²/g, jest spontaniczny i egzotermiczny. Mechanizm adsorpcji BPA na aktywowanym HOFA stanowi synergia fizysorpcji w mezoporowatej strukturze matrycy węglowej oraz specyficznej chemisorpcji na mineralnych centrach aktywnych. Mineralne centra aktywne tworzą, obecne w aktywowanym HOFA, spinele (V,Fe,Ni)₃O₄, odpowiedzialne za generowanie powierzchniowych kompleksów sfery wewnętrznej oraz silnych oddziaływań donor-akceptor typu π-π (EDA) z pierścieniami aromatycznymi BPA.

1. Basha, S. I.; Aziz, A.; Maslehuddin, M.; Ahmad, S.; Hakeem, A. S.; Rahman, M. M. Characterization, Processing, and Application of Heavy Fuel Oil Ash, an Industrial Waste Material – A Review. *Chem. Rec.* **2020**, 20 (12), 1568–1595.



Sesja posterowa



S04 PS01

Od projektowania do certyfikacji: kompleksowe podejście do opracowywania funkcjonalnych organiczno-mineralnych materiałów kompozytowych

Viktoria Paientko

*Chuiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine,
17 O. Mudrak Str., Kyiv 03164, Ukraine
payentkovv@gmail.com*

Opracowywanie nowoczesnych funkcjonalnych materiałów kompozytowych wymaga kompleksowego podejścia obejmującego wszystkie etapy ich cyklu życia - od doboru matrycy mineralnej i sposobu jej modyfikacji, poprzez eksperymentalne potwierdzenie właściwości funkcjonalnych i ocenę bezpieczeństwa, aż po przygotowanie materiału do praktycznego wdrożenia. Większość dotychczasowych badań koncentruje się na wybranych aspektach otrzymywania kompozytów, natomiast zagadnienia integracji badań fizykochemicznych, testów biologicznych oraz procedur oceny zgodności pozostają w znacznym stopniu niewystarczająco opracowane.

Celem pracy jest podsumowanie zasad projektowania funkcjonalnych organiczno-mineralnych materiałów kompozytowych oraz opracowanie kompleksowego schematu ich badań i przygotowania do praktycznego zastosowania. Zaproponowane podejście opiera się na sekwencyjnej realizacji kilku wzajemnie powiązanych etapów: doborze naturalnego nośnika mineralnego o odpowiednich właściwościach teksturalnych i powierzchniowych, mechanochemicznej lub chemicznej modyfikacji jego powierzchni, immobilizacji substancji biologicznie czynnych, kompleksowej charakterystyce fizykochemicznej otrzymanych kompozytów z wykorzystaniem nowoczesnych metod analitycznych, potwierdzeniu ich właściwości funkcjonalnych oraz kompleksowej ocenie bezpieczeństwa.

Szczególne miejsce w proponowanym schemacie zajmują standaryzowane biotesty roślinne, które traktowane są nie tylko jako metoda oceny fitotoksyczności, lecz również jako szybkie narzędzie przesiewowe do oceny zintegrowanej odpowiedzi biologicznej na wodne ekstrakty nowych materiałów kompozytowych. Biotesty umożliwiają wybór najbardziej perspektywicznych kompozycji już na wczesnym etapie projektowania oraz optymalizację ich składu jeszcze przed przeprowadzeniem kosztownych badań specjalistycznych.

Końcowym etapem cyklu życia funkcjonalnego materiału jest przygotowanie do oceny zgodności z obowiązującymi przepisami prawa oraz wymaganiami odpowiednich norm branżowych. W zależności od planowanego zastosowania obejmuje to zgromadzenie dokumentacji potwierdzającej stabilność, bezpieczeństwo, skuteczność oraz powtarzalność właściwości materiału, co stanowi podstawę procesu certyfikacji, rejestracji lub wdrożenia do produkcji.

Przedstawiona koncepcja łączy podstawowe badania z zakresu fizykochemii powierzchni z praktycznymi wymaganiami dotyczącymi projektowania innowacyjnych funkcjonalnych materiałów. Jej zastosowanie umożliwia skrócenie cyklu opracowywania nowych kompozycji, zwiększenie efektywności ich selekcji oraz zapewnienie naukowo uzasadnionego przejścia od badań laboratoryjnych do praktycznego wdrożenia.



S04 PS02

Wpływ budowy na właściwości powierzchniowe surfaktantów kationowych

Błażej Podlesny¹, Łukasz Lamch², Daria Długowska², Lucyna Hołysz³, Gabriela Wojtan¹,
Bronisław Jańczuk³, Piotr Batys¹, Ewelina Jarek¹, Kazimiera A. Wilk², Piotr Warszński¹

¹*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk*

²*Katedra Inżynierii i Technologii Procesów Chemicznych, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska*

³*Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemiczny, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej*

blazej.podlesny@ikifp.edu.pl

Związki powierzchniowo czynne, zwane również surfaktantami, są klasą cząstek chemicznych, która znalazła szereg różnorodnych zastosowań, poczynając od środków czyszczących wykorzystywanych w życiu codziennym, przez składniki środków ochrony roślin, aż po produkty kosmetyczne lub lecznicze. Cechą wspólną surfaktantów jest ich zdolność do obniżania napięcia powierzchniowego lub napięcia międzyfazowego. Każdy z surfaktantów posiada w swojej budowie część hydrofilową („głowę”) oraz hydrofobową („ogon”). Najczęściej stosowana forma klasyfikacji surfaktantów opiera się na budowie „głowy”, stąd można wyróżnić surfaktanty niejonowe oraz jonowe. Wśród surfaktantów jonowych wyróżnia się anionowe, kationowe i amfoteryczne, w zależności od ich ładunku elektrycznego.

Większość surfaktantów kationowych zawiera w swojej części hydrofilowej czwartorzędową sól amoniową. Istnieją również szerokie możliwości modyfikacji związków opartych o taką strukturę z wykorzystaniem stosunkowo prostych metod syntezy [1]. Co istotne, już niewielkie zmiany w strukturze surfaktantów wpływają na ich właściwości fizykochemiczne, co umożliwia celowe projektowanie ich struktury pod kątem konkretnych zastosowań. Równoczesny rozwój metod syntezy i technik charakterystyki, wsparty metodami obliczeniowymi, wydaje się kluczowym aspektem w zrozumieniu korelacji między budową surfaktantów a ich właściwościami powierzchniowymi.

W naszej pracy pokazujemy, jak różnorodna strukturalnie możliwa jest do otrzymania gama surfaktantów kationowych zawierających czwartorzędowe grupy amoniowe oraz jak to wpływa na ich adsorpcję na granicy faz ciecz/gaz oraz zwilżalność modelowych powierzchni [2-3]. Prezentujemy zaprojektowane przez nas ścieżki syntetyczne prowadzące do otrzymania rozgałęzionych na atomie azotu, surfaktantów dwugłowych i czworogłowych oraz surfaktantów zawierających oprócz czwartorzędowych grup amoniowych, ugrupowanie amidowe (liniowych, z podwójną głową i pojedynczym ogonem oraz z podwójną głową i ogonem). Zaobserwowaliśmy, że, dla związków bez ugrupowania amidowego, na aktywność powierzchniową wpływa obecność dodatków (NaOH, NaBr, HBr), co związane jest z ekranowaniem ładunku i protonacją/deprotonacją aminy trzeciorzędowej. W przypadku surfaktantów zawierających ugrupowanie amidowe, zróżnicowana budowa silnie wpływa na ich właściwości powierzchniowe. Przykładowo, struktury z podwójną głową znacznie lepiej zwilżają hydrofilowe powierzchnie ciał stałych, przy czym dla powierzchni hydrofobowych znacznie lepsze właściwości zwilżające mają roztwory surfaktantów o strukturze liniowej lub zawierające tylko jedną głowę. Obserwacje doświadczalne są poparte wynikami uzyskanymi na drodze symulacji metodami dynamiki molekularnej.

Podziękowania: Projekt został sfinansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki (grant nr. 2022/45/B/ST4/01184 (OPUS 23)).

[1] R. A. Gonçalves, et al., *J. Mol. Liq.* **2023**, 375, 121335

[2] Ł. Lamch, et al. **2026**, doi:10.26434/chemrxiv.15006424/v1.

[3] Ł. Lamch, et al., *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.* **2026**, 743, 140595



S04 PS03

Wykorzystanie peletu z otrębów pszenicznych jako prekursora węgla aktywnych do usuwania niesteroidowych leków przeciwzapalnych z fazy wodnej

Robert Wolski, Laura Śliwa, Sandra Ratajczyk, Robert Pietrzak

*Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej;
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;
robert.wolski@amu.edu.pl*

Obecnie obserwuje się gwałtowny wzrost zainteresowania problematyką obecności farmaceutyków, a zwłaszcza Niesteroidowych Leków Przeciwzapalnych (NLPZ), w środowisku wodnym. Substancje takie jak ibuprofen, diklofenak, ketoprofen czy meloksykam należą do najczęściej stosowanych leków o działaniu przeciwbólowym oraz przeciwzapalnym. Leki zawierające w/w substancje stosowane są zarówno u ludzi jak i u zwierząt. Szeroka ich dostępność bez recepty a co za tym idzie powszechne stosowanie skutkują przedostawaniem się tych związków do ścieków komunalnych, a następnie do wód powierzchniowych [1]. W wodach leki NLPZ są zagrożeniem dla wszystkich poziomów troficznych łańcuchów pokarmowych, w tym również dla zdrowia człowieka. Ze względu na ciągły dopływ NLPZ do ekosystemów istnieje potrzeba opracowania sposobów ich usuwania.

Konwencjonalne oczyszczalnie ścieków nie są w stanie skutecznie usuwać większości farmaceutyków, ponieważ stosowane w nich procesy biologiczne nie rozkładają związków o trwałej strukturze aromatycznej, typowej dla leków NLZP [1]. Jedną z najbardziej obiecujących metod usuwania jest adsorpcja na sorbentach węglowych. W porównaniu z innymi technikami, takimi jak procesy zaawansowanego utleniania czy procesy membranowe, adsorpcja wyróżnia się prostotą, niskim kosztem i dużą skutecznością [2].

Celem pracy było otrzymanie adsorbentów węglowych z materiału odpadowego jakim jest pelet z otrębów pszenicznych i zastosowanie ich w procesie usuwania niesteroidowych leków przeciwzapalnych z roztworów wodnych. Adsorbenty otrzymano na drodze aktywacji fizycznej stosując jako czynnik aktywujący dwutlenek węgla.

Materiały wyjściowe wysuszono a następnie aktywowano w piecu rurowym w atmosferze dwutlenku węgla. Temperatura aktywacji wynosiła 600°C, 700°C, 800°C i 900°C. Przepływ gazu wynosił 250 ml/min a czas aktywacji wynosił 60 minut. Próbkę wprowadzano do uprzednio nagrzanego pieca do wymaganej temperatury aktywacji.

Otrzymane węgle aktywne zostały poddane charakterystyce fizykochemicznej powierzchni. Przeprowadzono również badania adsorpcyjne ibuprofenu z roztworów wodnych.

Badania wykazały, że pelet z wysłódków buraczanych może być wykorzystany jako prekursor adsorbentów węglowych. Wyraźnie widać wpływ temperatury aktywacji na rozwinięcie struktury porowatej węgla aktywnych. W przypadku aktywacji fizycznej peletu z otrębów pszenicznych węgle aktywne wykazują dobrą efektywność w usuwaniu ibuprofenu z roztworów wodnych. Zdolności sorpcyjne otrzymanych węgli również są od temperatury aktywacji. Również ze wzrostem temperatury wzrasta zawartość substancji mineralnych w próbkach węgla aktywnego.

Literatura:

- [1]. Przedpeńska, L., Witczak, A. & Pokorska-Niewiada, K. Non-steroidal anti-inflammatory drugs as emerging water and food contaminants: review. *Rev Environ Sci Biotechnol* 24, 571–605 (2025). <https://doi.org/10.1007/s11157-025-09735-5>
- [2]. Jinbo Ouyang, Limin Zhou, Zhirong Liu, Jerry Y.Y. Heng, Wenqian Chen, Biomass-derived activated carbons for the removal of pharmaceutical micropollutants from wastewater: A review, *Separation and Purification Technology*, Volume 253, 2020, 117536, ISSN 1383-5866, <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2020.117536>.



S04 PS04

Materiały sorpcyjne oparte na nanokryształach celulozy oraz krzemionkach organicznych

Joanna Szymkowiak

Wydział Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań
joanna.szymkowiak@amu.edu.pl

W przyrodzie występuje wiele materiałów wykazujących zjawisko koloryzacji strukturalnej, wynikające z ich uporządkowanej organizacji na poziomie mikro- i nanostrukturalnym. Przykładami takich układów są pancerze chrząszczy *Chrysina gloriosa*, skrzydła motyli *Morpho* oraz owoce *Pollia condensata*.¹ W warunkach laboratoryjnych opalizujące materiały można otrzymać z wykorzystaniem nanokryształów celulozy (CNC), które dzięki procesowi samoorganizacji tworzą lewoskrętną strukturę helikalną.²

Nanokrystały celulozy znajdują zastosowanie w syntezie biokompozytów oraz jako szablony do otrzymywania chiralnych, mezoporowatych krzemionek organicznych.^{2,3} Szczególnie interesującą grupę stanowią chiralne, nematyczne mezoporowate krzemionki organiczne (CNMO), charakteryzujące się unikalnymi właściwościami sorpcyjnymi, optycznymi i opalizującymi.^{4,5}

W niniejszej pracy zostaną przedstawione efektywne metody funkcjonalizacji materiałów hybrydowych opartych na nanokryształach celulozy oraz krzemionkach organicznych. Otrzymane materiały wykazują właściwości sorpcyjne oraz zdolność do kompleksowania jonów metali, dzięki czemu mogą znaleźć zastosowanie jako wskaźniki wilgotności oraz membrany do oczyszczania wody.

Badania zostały sfinansowane w ramach grantu NCN MINIATURA 9 (DEC–2025/09/X/ST5/00539) oraz stypendium Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej (Program im. M. Bekkera NAWA; PPN/BEK/2019/1/00018) zrealizowanego w grupie badawczej Prof. Marka MacLachlana na Uniwersytecie Kolumbii Brytyjskiej (Kanada).

1. A. Tran, C.E. Boott, M.J. MacLachlan, *Adv. Mater.* **2020**, 32, 1905876.
2. Y. Habibi, L.A. Lucia, O.J. Rojas, *Chem. Rev.* **2010**, 110, 3479–3500.
3. K.E. Shopsowitz, W. Y. Hamad, M.J. MacLachlan, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, 134, 867–870.
4. J.K. Szymkowiak, C.M. Walters, W.Y. Hamad, M.J. MacLachlan, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2022**, e202200218.
5. J.K. Szymkowiak, L.J. Andrew, W.Y. Hamad, M.J. MacLachlan, *Nanoscale* **2024**, 16(45), 20948–20954.



S04 PS05

Wpływ aktywacji plazmowej na właściwości zwilżania powierzchni szklanych modyfikowanych HMDS

Paweł Bodeńko*, Sylwia Pasieczna-Patkowska**, Konrad Terpiłowski*

**Katedra Zjawisk Międzyfazowych, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej w Lublinie, **Katedra Technologii Chemicznej, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej w Lublinie
Plac Marii Curie Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin
terpil@umcs.pl*

Modyfikacja powierzchni materiałów z wykorzystaniem zimnej plazmy stanowi jedną z najbardziej efektywnych metod kształtowania ich właściwości międzyfazowych. Dotychczasowe badania [1] koncentrowały się głównie na pojedynczej aktywacji plazmowej poprzedzającej silanizację powierzchni. Celem niniejszej pracy było sprawdzenie, czy zastosowanie wielokrotnej aktywacji plazmowej umożliwia wytworzenie nowych centrów aktywnych na powierzchni szkła, prowadząc do skuteczniejszego przyłączenia cząsteczek heksametylodiisilazanu (HMDS) oraz poprawy właściwości hydrofobowych. Powierzchnie szklane poddawano aktywacji z wykorzystaniem plazmy tlenowej oraz argonowej, a następnie modyfikowano HMDS osadzonym z fazy gazowej. Po pierwszej modyfikacji przeprowadzano kolejną aktywację plazmową o zróżnicowanym czasie ekspozycji, po której ponownie наносzono HMDS. Właściwości powierzchni oceniano na podstawie pomiarów statycznego kąta zwilżania wodą oraz analizy topografii metodą profilometrii optycznej. Uzyskane wyniki wykazały, że skuteczność wielokrotnej aktywacji zależy zarówno od rodzaju gazu plazmotwórczego, jak i czasu ekspozycji. Najkorzystniejsze rezultaty uzyskano dla drugiej aktywacji plazmą argonową prowadzonej przez 5 s, dla której średni kąt zwilżania wzrósł z około 82° po pierwszej modyfikacji do ponad 93°, przy jednoczesnym znacznym rozwinięciu powierzchni. Średnia chropowatość Ra zwiększyła się z około 2 nm dla szkła niemodyfikowanego do ponad 49 nm po wielokrotnej aktywacji i silanizacji, co wskazuje na istotną zmianę topografii powierzchni. Z kolei zbyt długie czasy ponownej aktywacji plazmą tlenową prowadziły do pogorszenia efektu hydrofobizacji, prawdopodobnie wskutek częściowego usuwania wcześniej przyłączonych grup silanowych. Otrzymane wyniki potwierdzają, że wielokrotna aktywacja plazmowa stanowi skuteczne narzędzie do kontrolowania właściwości powierzchni materiałów. Odpowiedni dobór parametrów procesu umożliwia zwiększenie liczby aktywnych miejsc reakcji, poprawę efektywności silanizacji oraz uzyskanie bardziej rozwiniętej struktury powierzchni, co może znaleźć zastosowanie podczas projektowania materiałów hydrofobowych, powłok funkcjonalnych oraz powierzchni samoczyszczących.

1. Terpiłowski, K.; Chodkowski, M.; Pakhlov, E.; Pasieczna-Patkowska, S.; Kuśmierz, M.; Azat, S.; Pérez-Huertas, S. Hydrophobization of Cold Plasma Activated Glass Surfaces by Hexamethyldisilazane Treatment. *Molecules* 2024, 29, 2645. <https://doi.org/10.3390/molecules29112645>



S04 PS06

Kompozyty nienasyconej żywicy poliestrowej z zawartością funkcjonalizowanych napelniaczy

Rafał Oliwa, Joanna Oliwa, Mariusz Oleksy

¹Katedra Kompozytów Polimerowych, Wydział Chemiczny, Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza, Al. Powstańców Warszawy 6, 35-029 Rzeszów
oliwa@prz.edu.pl

Glinokrzemiany, takiej jak montmorylonit (MMT), kaolinit (K) i haloizyt (HNT), zyskały znaczną uwagę jako efektywne i ekonomiczne napelniacze i nanonapelnacze tworzyw polimerowych, poprawiające ich właściwości użytkowe. Stanowią też odrębną grupę dodatków stosowanych głównie do wywołania synergii oddziaływania niepalniaczy w zwiększeniu odporności na płomień i tłumieniu powstawania dymów głównie poprzez katalityczne działanie w tworzeniu zgorzeliny w fazie skondensowanej, która jest dodatkowo stabilizowana przez obecność krzemu [1]. W zależności od struktury i zawartości tlenu, także grup hydroksylowych krzemiany cechują się różną reaktywnością i zdolnością do funkcjonalizacji, która jest konieczna w kontekście poprawy kompatybilności z matrycą polimerową i nadania dodatkowych cech funkcjonalnych. Modyfikację krzemianów można prowadzić stosując między innymi technologie samoorganizacji supramolekularnej poprzez niekwalencyjne oddziaływania takie jak: wiązania wodorowe, oddziaływania elektrostatyczne, siły van der Waalsa oraz oddziaływania π - π , lub poprzez trwałe wiązanie kowalencyjne za pomocą silanów [2].

Głównym założeniem prowadzonych badań było opracowanie wielofunkcyjnych napelniaczy na bazie krzemianów stosowanych jako dodatki synergiczne w poprawie odporności na płomień kompozytów polimerowych. W tym celu przeprowadzono próby modyfikacji zewnętrznej i wewnętrznej HNT za pomocą niepalniaczy fosforowych takich jak metylofosfonian dimetylu, fosforan trietylu oraz polifosforan amonu, a także melaminy. Z kolei montmorylonit zmodyfikowano za pomocą fosforanu melaminy poprzez interkalacje jego płytek.

Otrzymane zmodyfikowane wielofunkcyjne krzemiany zastosowano w kompozytach nienasyconych żywicy poliestrowych i określono ich wpływ na właściwości mechaniczne, palność oraz strukturę wytworzonych kompozytów porównując uzyskane wyniki do kompozytów zawierających niemodyfikowane glinokrzemiany. Przeprowadzone badania wykazały, że zastosowanie glinokrzemianów w postaci bentonitu i haloizytu wpływa na właściwości mechaniczne oraz palność kompozytów na osnowie nienasyconej żywicy poliestrowej. Zakres zmian zależał zarówno od rodzaju zastosowanego napelnacza, jak i sposobu jego modyfikacji. Uzyskane wyniki eksperymentalne jednoznacznie wskazują, że dobór rodzaju glinokrzemianu oraz sposobu jego modyfikacji powinien być uzależniony od przewidywanego zastosowania kompozytu i oczekiwanych właściwości użytkowych materiału.

Badania dofinansowano ze środków Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach Programu „Regionalna Inicjatywa Doskonałości”, nr umowy RID/SP/0032/2024/01.

[1] Yan W., Yu J., Zhang M., Wang T., Li W., Qin S., Long L.: *Journal of Fire Sciences* 2018, 36. doi: 10.1177/0734904117740820.

[2] Manju P., Santhana Gopala K.P.: Biodegradable Polyvinyl Alcohol/Starch/Halloysite Nanotube Bionanocomposite: Preparation and Characterization. In: Visakh P. M. (eds) *Biodegradable and Environmental Applications of Bionanocomposites. Advanced Structured Materials*, Springer, Cham. 2023, 177. https://doi.org/10.1007/978-3-031-13343-5_8



S04 PS07

Wpływ kationowych systemów fotoinicjujących na proces fotopolimeryzacji i jakość wydruków 3D

Joanna Ortyl^{1,2,3}, Emilia Ferenc¹, Filip Petko^{1,2}, Andrzej Świeży^{4,2}, Monika Topa-Skwarczyńska¹

¹ Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki w Krakowie, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków, Polska.

² Photo HiTech, ul. Bobrzyńskiego 14, 30-348 Kraków, Polska.

³ Photo4Chem, ul. Lea 114, 30-348 Kraków, Polska.

⁴ Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie, Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki, al. Adama Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Polska

jortyl@pk.edu.pl

Technologie druku 3D wykorzystujące fotopolimeryzację stanowią obecnie jedną z najbardziej perspektywicznych metod wytwarzania precyzyjnych elementów o złożonej geometrii. Kluczowym czynnikiem decydującym o szybkości utwardzania materiału, głębokości penetracji promieniowania oraz dokładności odwzorowania projektowanego modelu jest odpowiednio dobrany system fotoinicjujący. Szczególne znaczenie mają kationowe systemy fotoinicjujące, umożliwiające polimeryzację monomerów epoksydowych i winyloeterowych, które charakteryzują się ograniczoną wrażliwością na tlen, niewielkim skurczem polimeryzacyjnym oraz możliwością kontynuowania reakcji po zakończeniu naświetlania.

W ramach przeprowadzonych badań oceniono wpływ rodzaju i składu kationowego systemu fotoinicjującego na przebieg fotopolimeryzacji oraz właściwości kompozycji przeznaczonych do druku 3D. Analizowano kinetykę utwardzania, stopień konwersji grup funkcyjnych, czas żelowania oraz zdolność kompozycji do polimeryzacji pod wpływem promieniowania z zakresu bliskiego ultrafioletu i światła widzialnego. Oceniono również wpływ zastosowanych inicjatorów na głębokość utwardzania, rozdzielczość wydruków, dokładność wymiarową oraz jakość powierzchni otrzymanych elementów.

Uzyskane wyniki wykazały, że odpowiednia modyfikacja struktury inicjatora pozwalają na zwiększenie efektywności generowania aktywnych centrów kationowych i dostosowanie właściwości optycznych kompozycji do źródeł światła stosowanych w drukarkach 3D. Dobór systemu inicjującego miał bezpośredni wpływ na szybkość tworzenia sieci polimerowej, stabilność procesu druku oraz dokładność odwzorowania geometrii modelu.

Przeprowadzone badania potwierdziły, że nowoczesne kationowe systemy fotoinicjujące mogą stanowić podstawę do opracowania materiałów fotoutwardzalnych o kontrolowanym procesie sieciowania, ograniczonym skurczu oraz wysokiej precyzji druku. Otrzymane rezultaty wskazują na ich duży potencjał w projektowaniu nowych żywic i kompozytów przeznaczonych do zaawansowanych zastosowań w technologii addytywnej.

Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki (NCN) w ramach projektu OPUS nr UMO-2025/57/B/ST11/03249.



S04 PS08

Rola *n*-heksanu i oleinianu etylu w modyfikacji oleju rzepakowego i jego właściwości smarnych

Anna Zdziennicka, Katarzyna Szymczyk, Bronisław Jańczuk

*Katedra Zjawisk Międzyfazowych, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii,
Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie
e-mail: anna.zdziennicka@mail.umcs.pl*

Olej rzepakowy (RO) jest surowcem szeroko wykorzystywanym w produkcji biopaliw, jednak jego znaczenie nie ogranicza się wyłącznie do tego obszaru. Coraz częściej rozważa się jego zastosowanie jako ekologicznej bazy dla cieczy smarnych, zwłaszcza w kontaktach tribologicznych, takich jak materiały ściernie. Pomimo korzystnych cech środowiskowych i dostępności, jego bezpośrednie wykorzystanie w roli środka smarnego jest ograniczone przez nieoptymalne właściwości fizykochemiczne, w tym zwilżalność, napięcie powierzchniowe, pracę adhezji oraz lepkość dynamiczną. Parametry te w wielu przypadkach nie zapewniają wymaganej efektywności smarowania, co uzasadnia potrzebę ich modyfikacji. W związku z tym podjęto próbę poprawy właściwości oleju rzepakowego poprzez zastosowanie dodatków *n*-heksanu (Hex) oraz oleinianu etylu (EO), które pełnią funkcję modyfikatorów jego charakterystyki fizykochemicznej. Analizę prowadzono dla układów dwu- i trójskładnikowych, opierając się na pomiarach kąta zwilżania, napięcia powierzchniowego oraz lepkości dynamicznej [1,2]. Badania realizowano na powierzchniach PTFE, PMMA oraz stali, co umożliwiło ocenę oddziaływań w różnych warunkach kontaktu cieczy z podłożem. Na podstawie wyników wyznaczono składowe i parametry napięcia powierzchniowego, pracę adhezji oraz oszacowano ciśnienie warstwy adsorpcyjnej, istotne dla opisu procesów zwilżania.

Uzyskane rezultaty wykazały, że dodatek *n*-heksanu prowadzi do obniżenia napięcia powierzchniowego, lepkości oraz pracy adhezji, jednocześnie wyraźnie poprawiając zwilżalność badanych powierzchni. Z kolei oleinian etylu powoduje istotną redukcję lepkości przy stosunkowo niewielkim wpływie na pozostałe parametry układu. Najbardziej korzystny efekt w zakresie właściwości smarnych i użytkowych zaobserwowano dla mieszaniny zawierającej jednocześnie *n*-heksan i oleinian etylu, co wskazuje na jej potencjał aplikacyjny zarówno w tribologii, jak i w technologiach biopaliwowych.

[1] K. Szymczyk, A. Zdziennicka, B. Jańczuk, *Energies*, 2025, 18(14), 3802;

[2] A. Zdziennicka, K. Szymczyk, B. Jańczuk, *Appl. Sci.* 2025, 15(17), 9243.



S04 PS09

Zaawansowane sieci polimerowe z nowym ciekłokrystalicznym monomerem epoksydowym

Beata Mossety-Leszczak¹, Maciej Kisiel¹, Katarzyna Noga¹, Magdalena Włodarska², Beata Strachota³, Adam Strachota³

¹Wydział Chemiczny, Politechnika Rzeszowska, Al. Powstańców Warszawy 12, 35-029 Rzeszów, mossety@prz.edu.pl, m.kisiel@prz.edu.pl

²Instytut Fizyki, Politechnika Łódzka, ul. Wólczańska 219, 90-924 Łódź, magdaw@p.lodz.pl

³Instytut Chemii Makromolekularnej, Czeska Akademia Nauk, Heyrovskeho nam. 2, CZ-162 00 Praga, beata@imc.cas.cz, strachota@imc.cas.cz

W ramach przeprowadzonych badań zrealizowano syntezę oraz kompleksową analizę właściwości nowej **ciekłokrystalicznej żywicy epoksydowej MU20** (bis[4-(9,10-epoksydekanoiloksy)benzoesan] *p*-fenylenu). Strukturę monomeru, otrzymanego w dwuetapowym procesie z wydajnością końcową 64%, potwierdzono metodami ¹H-NMR oraz FT-IR.

Badania kalorymetryczne (DSC), mikroskopowe (POM) oraz rentgenograficzne (XRD) wykazały, że monomer MU20 charakteryzuje się **stabilną mezofazą** w szerokim zakresie temperatur, przekraczającym 60°C, co czyni go doskonałą matrycą do tworzenia zaawansowanych sieci polimerowych. Proces sieciowania kompozycji z utwardzaczem 4,4'-diaminodifenylometanem (4,4'-DDM) poddano analizie przy różnych szybkościach ogrzewania oraz w warunkach izotermicznych.

Kluczowe wnioski z badań wskazują, że proces sieciowania przebiega najefektywniej przy niskich szybkościach ogrzewania (2 K/min), co sprzyja lepszemu uporządkowaniu cząsteczek i uzyskaniu wyższej temperatury zeszklenia. Analiza procesów izotermicznych wykazała, że temperatura **155°C** sprzyja tworzeniu struktur o najwyższym stopniu anizotropii, choć pełne usieciowanie wymaga zastosowania wyższych temperatur (165–175°C), w których jednak następuje spadek uporządkowania strukturalnego.

Zastosowanie **jednorodnego pola magnetycznego** o indukcji 1,2 T znacząco wspomogło orientację mezogenów i podniosło temperaturę zeszklenia wytworzonych sieci, mimo że obecność pola nieznacznie spowalniała samą reakcję chemiczną. Istotnym spostrzeżeniem jest wpływ budowy molekularnej na zdolność do samoorganizacji – stwierdzono, że **skrócenie alifatycznego łącznika do 10 atomów węgla** wyraźnie poprawia zdolność do porządkowania strukturalnego w porównaniu do wcześniej badanych analogów o łańcuchu 11-węglowym. Uzyskane rezultaty potwierdzają wysoki potencjał żywicy MU20 w projektowaniu inteligentnych materiałów polimerowych o precyzyjnie regulowanych właściwościach anizotropowych, znajdujących potencjalne zastosowanie w nowoczesnych materiałach *high-tech*.



Dofinansowano ze środków Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach Programu „Regionalna Inicjatywa Doskonałości”, nr umowy RID/SP/0032/2024/01



Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego



S04 PS10

Właściwości fizykochemiczne i funkcjonalne kostek do mycia ciała zawierających substancje bioaktywne z wyłoków z winogron

Wiktoria Nowak, Tomasz Wasilewski, Zofia Hordyjewicz-Baran, Natalia Stanek-Wandzel, Joanna Fleszer, Izabela Bonk-Barbara, Edyta Goły

*Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Chemii Surowców Odnawialnych
ul. Energetyków 9, 47-225 Kędzierzyn-Koźle
zofia.hordyjewicz@icso.lukasiewicz.gov.pl*

W ostatnich latach obserwuje się dynamiczny rozwój produktów odpowiadających społecznym oczekiwaniom w zakresie zrównoważonego rozwoju oraz gospodarki o obiegu zamkniętym. Przykładem tego trendu są kosmetyki myjące w formie stałej (bezwodnej), które coraz częściej zastępują ich płynne odpowiedniki. Rosnące zainteresowanie produktami i opakowaniami wolnymi od tworzyw sztucznych dodatkowo zwiększa atrakcyjność takich preparatów, ponieważ mogą one być przechowywane i dystrybuowane w prostych opakowaniach kartonowych a nawet bez opakowań, co w przypadku produktów płynnych jest praktycznie niemożliwe. Ponadto wysokiej jakości preparaty do mycia w formie kostek są produktami silnie skoncentrowanymi, co prowadzi do zmniejszenia ich rozmiarów i masy. Przekłada się to na ograniczenie ich wpływu na środowisko poprzez zmniejszenie zużycia materiałów opakowaniowych oraz redukcję emisji i kosztów związanych z transportem.

W pracy przedstawiono ocenę właściwości fizykochemicznych oraz funkcjonalnych innowacyjnych preparatów myjących w postaci syndetu w kostce przeznaczonego do codziennej pielęgnacji skóry. Formułacje opracowano zgodnie z koncepcją „ekstrakcji pożyczkowej”, polegającą na wykorzystaniu wybranych składników receptury kosmetycznej jako medium ekstrakcyjnego do pozyskiwania związków bioaktywnych z surowców roślinnych, a następnie bezpośrednim włączeniu otrzymanego ekstraktu do gotowego produktu [1,2].

Jako źródło substancji aktywnych wykorzystano wyłoki winogronowe, stanowiące produkt uboczny przemysłu winiarskiego. Otrzymane ekstrakty wprowadzono do opracowanych formułacji syndetów, a następnie przeanalizowano ich wybrane właściwości fizykochemiczne i funkcjonalne.

Uzyskane wyniki potwierdzają możliwość efektywnego wykorzystania produktów ubocznych przemysłu winiarskiego jako źródła składników aktywnych w nowoczesnych formułacjach kosmetycznych. Jednocześnie wykazano, że zastosowanie wyłoków winogronowych w procesie wytwarzania preparatów kosmetycznych stanowi obiecujące rozwiązanie umożliwiające projektowanie wielofunkcyjnych, zrównoważonych produktów wpisujących się w założenia gospodarki o obiegu zamkniętym oraz trend upcyklingu surowców odpadowych.

Literatura

- [1] T. Wasilewski, Z. Hordyjewicz-Baran, M. Zarębska, N. Stanek, E. Zajszy-Turko, M. Tomaka, T. Bujak, Z. Nizioł-Łukaszewska, Sustainable Green Processing of Grape Pomace Using Micellar Extraction for the Production of Value-Added Hygiene Cosmetics, *Molecules* 27 (2022) 2444-2471.
- [2] Z. Hordyjewicz-Baran, T. Wasilewski, M. Zarębska, N. Stanek-Wandzel, E. Zajszy-Turko, M. Tomaka, M. Zagórska-Dziok, Micellar and solvent loan chemical extraction as a tool for the development of natural skin care cosmetics containing substances isolated from grapevine buds, *Applied Sciences* 14 (2024) 1420–1440.



S04 PS11

Synteza bezizocyjanianowych poliuretanów metodą polikondensacji w stanie stałym

Dominik Wołosz¹, Martyna Musiatowicz¹, Paweł Grzegorz Parzuchowski¹, Aleksandra Marta Fage², Grzegorz Węgrzyk³, Subrajeet Deshmukh⁴, Maria Balk⁵, Tomasz Gołofit¹, Robert Brüll⁴

¹ – Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, Warszawa, Polska

² – Fraunhofer Institute for Chemical Technology ICT, Pfinztal, Niemcy

³ – Politechnika Warszawska, Wydział Inżynierii Materiałowej, Warszawa, Polska

⁴ – Fraunhofer Institute for Structural Durability and System Reliability LBF, Darmstadt, Niemcy

⁵ – Institute of Functional Materials for Sustainability, Helmholtz-Zentrum Hereon, Teltow, Niemcy

dominik.wolosz@pw.edu.pl

Bezizocyjanianowe poliuretany (NIPU) należą do grupy zrównoważonych materiałów polimerowych, które mogą być otrzymywane z dwutlenku węgla oraz z surowców pochodzenia roślinnego. Stanowią atrakcyjną alternatywę dla klasycznych poliuretanów otrzymywanych z toksycznych izocyjanianów. NIPU były dotychczas otrzymywane głównie poprzez polikondensację w stanie stopionym, której efektywność była ograniczana przez silny wzrost lepkości oraz konieczność prowadzenia procesu w wysokiej temperaturze, sprzyjającej reakcjom ubocznym i degradacji termicznej polimeru.

W celu przezwyciężenia tych ograniczeń, opracowano nową metodę syntezy NIPU poprzez polikondensację w stanie stałym. Reakcja przebiegała głównie w fazie amorficznej polimeru. Temperatura reakcji zawierała się w przedziale pomiędzy temperaturą zeszklenia a temperaturą topnienia. W celu usprawnienia dyfuzji produktów małowcząsteczkowych, syntezy prowadzono w stałym przepływie gazu obojętnego (azotu) przez rozdrobniony proszek NIPU.

W ramach przeprowadzonych badań określono wpływ wielkości cząstek NIPU oraz temperatury syntezy na przebieg procesu krystalizacji, transuretanicacji (polikondensacji) w ciele stałym, a także na właściwości końcowe materiałów. Otrzymane NIPU charakteryzowały się większą masą molową niż produkty transuretanicacji w roztworze czy w stanie stopionym. Ponadto, wykazywały większą stabilność termiczną i były bardziej wytrzymałe mechanicznie niż tradycyjne NIPU. Co interesujące, ich właściwości mechaniczne były stabilne po trzykrotnym przetwórstwie w podwyższonej temperaturze.

Podziękowanie: Badania zostały dofinansowane przez Radę Naukową Dyscypliny Inżynieria Chemiczna (Politechnika Warszawska) w ramach grantu IChem-2026 504/05097/1020/43.062603 RND ICHEM.7_pb.

1. D. Wołosz*, A. M. Fage, G. Węgrzyk, M. Musiatowicz, S. Deshmukh, M. Balk, T. Gołofit, R. Brüll, *Macromolecules*, 2025, **58** (22), 12366-12377.



S04 PS12

Remediacja gruntów skażonych zanieczyszczeniami ropopochodnymi

Sławomir Kaczmarek¹, Iwona Kupich², Małgorzata Kacprzak³, Robert Wolski¹, Robert Pietrzak¹

¹ Uniwersytet im Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii,

² Politechnika Częstochowska, Wydział Infrastruktury i Środowiska

³ Politechnika Warszawska, Wydział Inżynierii Lądowej, Mechaniki i Petrochemii
slakac1@amu.edu.pl

Zanieczyszczenie gruntów węglowodorami ropopochodnymi stanowi istotny problem środowiskowy. Jego usuwanie utrudniają niska biodostępność zanieczyszczeń, ich toksyczność wobec mikroorganizmów glebowych oraz niekorzystne warunki fizykochemiczne podłoża, które ograniczają skuteczność naturalnych procesów biodegradacji. W pracy porównano skuteczność trzech strategii bioremediacyjnych: zastosowania nawozu organiczno-mineralnego, wprowadzenia do gleby biowęgla oraz vermiremediacji z wykorzystaniem dżdżownic *Eisenia fetida*, w celu wskazania podejścia najbardziej efektywnego w rekultywacji gruntów skażonych substancjami ropopochodnymi.

Spośród analizowanych wariantów najskuteczniejszy okazał się nawóz organiczno-mineralny, dla którego odnotowano redukcję zawartości węglowodorów ropopochodnych (TPH) o 63,5% oraz wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych (WWA) o 58,8%. Zastosowaniu tej strategii towarzyszyły dodatkowo: regulacja odczynu gleby do wartości zbliżonych do obojętnych, wzrost aktywności dehydrogenaz (DHA), świadczący o zwiększonej aktywności mikrobiologicznej podłoża, a także wzbogacenie gleby w makroelementy — fosfor, magnez, siarkę i potas. Biowęgiel oraz vermiremediacja z udziałem *Eisenia fetida* również wpłynęły korzystnie na właściwości gleby i aktywność mikrobiologiczną, jednak w mniejszym stopniu niż nawóz organiczno-mineralny.

Uzyskane wyniki wskazują na możliwość integracji poszczególnych strategii rekultywacyjnych w celu osiągnięcia efektu synergistycznego i zwiększenia całkowitej skuteczności remediacji terenów zdegradowanych zanieczyszczeniami ropopochodnymi. Wyniki badań mogą stanowić podstawę do opracowania zoptymalizowanych, przyjaznych środowisku technologii rekultywacji gruntów skażonych substancjami ropopochodnymi.

Słowa kluczowe: bioremediacja, zanieczyszczenia ropopochodne, nawóz organiczno-mineralny, biowęgiel, vermiremediacja, *Eisenia fetida*, aktywność mikrobiologiczna gleby



S04 PS13

Funkcjonalizacja pochodnych fluorenu w kierunku materiałów o właściwościach elektrochromowych

Paweł Kalarus, Agata Szłapa-Kula, Michał Filapek, Sławomir Kula

*Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych, Instytut Chemii;
ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice;
pawel.kalarus@us.edu.pl*

Fluoren należy do grupy związków powszechnie wykorzystywanych jako rdzeń molekularny w projektowaniu materiałów funkcjonalnych. W znacznej mierze wynika to z jego atrakcyjnych właściwości fizykochemicznych oraz ogromnych możliwości modyfikacji strukturalnych umożliwiających dostrajanie wspomnianych właściwości do zastosowań[1][2][3]. Z tego względu pochodne fluorenu stanowią obiecującą grupę związków do wykorzystania m.in. w organicznych diodach emitujących światło (OLED)[1][2][3] oraz w ogniach perowskitowych (PSC)[3]. Co więcej, odpowiednio zaprojektowana funkcjonalizacja fluorenu umożliwia regulowanie procesów przeniesienia ładunku, a także właściwości optycznych i elektrochemicznych, decydujących o przydatności tego typu materiałów w zastosowaniach elektrochromowych[1][2]. Rosnące zainteresowanie materiałami elektrochromowymi wynika z możliwości odwracalnego sterowania ich właściwościami optycznymi za pomocą bodźca elektrycznego, co stwarza szerokie perspektywy zastosowań w nowoczesnych technologiach, takich jak inteligentne okna[1][2].

W prezentowanych badaniach przeprowadzono funkcjonalizację pochodnych fluorenu ukierunkowaną na otrzymanie nowych związków o potencjalnym zastosowaniu w materiałach elektrochromowych. Kolejne etapy syntezy zrealizowano z wykorzystaniem reakcji sprzęgania Sonogashiry, kondensacji Knoevenagela oraz reakcji alkilowania. Otrzymane produkty wyizolowano i oczyszczono metodami chromatograficznymi oraz poprzez krystalizację. Zsyntezowane związki poddano charakterystyce fizykochemicznej obejmującej analizę stabilności termicznej, właściwości optycznych oraz elektrochemicznych. Badania przeprowadzono z wykorzystaniem analizy termogravimetrycznej, spektroskopii UV–Vis i fluorescencyjnej, woltamperometrii cyklicznej, różnicowej woltamperometrii pulsowej oraz spektroelektrochemii. Uzyskane wyniki wskazują, że odpowiednio zaprojektowana funkcjonalizacja rdzenia fluorenu stanowi skuteczne narzędzie do kształtowania właściwości materiałów organicznych. Otrzymane związki wykazują wysoką stabilność termiczną i elektrochemiczną oraz odwracalny efekt elektrochromowy przy niskich wartościach potencjału, co potwierdza ich przydatność jako kandydatów do zastosowań w inteligentnych oknach i innych urządzeniach optoelektronicznych.

1. P. Kalarus, *Molecules* 2025, 30, 192.
2. L. Manjakkal, *J. Mater. Chem.* 2012, 22, 5319–5329.
3. A. Szłapa-Kula, *Energies* 2023, 16, 8027.



S04 PS14

Ekokompatybilne adsorbenty tlenkowe do efektywnego usuwania antybiotyków ze środowiska wodnego

Urszula Kielkowska, Krzysztof Mazurek, Sebastian Drużyński, Marcin Cichosz, Bartłomiej Iglński, Anna Kujawska, Adriana Wróblel-Kaszanek

*Katedra Technologii Chemicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
ul. Gagarina 7; 87 – 100 Toruń
ulak@umk.pl*

Antybiotyki należą do najczęściej stosowanych substancji farmaceutycznych wykorzystywanych w medycynie, weterynarii oraz intensywnej hodowli zwierząt. Ich powszechne i często nadmierne stosowanie prowadzi do nieustannego wprowadzania pozostałości tych związków do środowiska naturalnego. Antybiotyki przedostają się do wód powierzchniowych i gruntowych głównie wraz ze ściekami komunalnymi, odpadami pochodzącymi z gospodarstw rolnych, hodowli zwierząt oraz ściekami przemysłowymi i szpitalnymi. Istotnym problemem jest fakt, że konwencjonalne oczyszczalnie ścieków nie są projektowane z myślą o skutecznym usuwaniu zanieczyszczeń farmaceutycznych, przez co znaczna część antybiotyków pozostaje w oczyszczonych wodach i trafia do środowiska naturalnego. Obecność tych substancji, nawet w niewielkich stężeniach, może prowadzić do długotrwałych zmian ekologicznych, zaburzeń równowagi mikrobiologicznej w ekosystemach wodnych oraz toksycznego oddziaływania na organizmy żywe. Szczególnie niebezpiecznym skutkiem obecności antybiotyków w środowisku jest wzrost zjawiska antybiotykooporności. Długotrwała ekspozycja mikroorganizmów na niskie stężenia farmaceutyków zwiększa presję selekcyjną, sprzyjając rozwojowi szczepów opornych oraz transferowi genów oporności między drobnoustrojami. Zjawisko to stanowi obecnie jedno z największych wyzwań dla zdrowia publicznego na świecie, ponieważ prowadzi do ograniczenia skuteczności terapii przeciwdrobnoustrojowych, zwiększenia liczby zakażeń trudnych do leczenia oraz wzrostu ryzyka powikłań zdrowotnych i śmiertelności. W związku z tym konieczne jest opracowanie nowoczesnych, wydajnych i selektywnych metod usuwania antybiotyków z wody i ścieków.

W odpowiedzi na potrzebę opracowania skutecznych metod eliminacji zanieczyszczeń farmaceutycznych przeprowadzono badania nad przyjaznymi dla środowiska naturalnego adsorbentami tlenkowymi. Materiały tego typu wyróżniają się wysoką stabilnością chemiczną i termiczną, rozwiniętą powierzchnią właściwą, obecnością licznych centrów aktywnych oraz możliwością kontrolowania parametrów strukturalnych na etapie syntezy, co czyni je obiecującymi adsorbentami do zastosowań środowiskowych. Otrzymane materiały zostały poddane szczegółowej charakterystyce fizykochemicznej, obejmującej analizę morfologii powierzchni, składu pierwiastkowego, struktury porowej oraz parametrów teksturalnych, z wykorzystaniem technik SEM-EDS, XRF i BET.

Oceniono także zdolność adsorpcyjną materiałów względem wybranych antybiotyków β -laktamowych i tetracyklinowych w zależności od czasu kontaktu, temperatury, pH roztworu, dawki adsorbentu oraz początkowego stężenia zanieczyszczeń. Uzyskane wyniki wskazały na wysoką efektywność usuwania badanych związków z roztworów wodnych oraz dużą stabilność procesu w obecności jonów współwystępujących w wodach naturalnych, co potwierdza odporność materiałów na efekty konkurencyjnej adsorpcji. Zaobserwowano również korzystne właściwości sorpcyjne w szerokim zakresie parametrów procesowych, co wskazuje na potencjał aplikacyjny materiałów w rzeczywistych układach oczyszczania wód i ścieków. Analiza kinetyczna i izotermiczna procesu sugerowała dominujący udział oddziaływań chemisorpcji na jednorodnych centrach aktywnych materiału, odpowiadających za wysoką selektywność i wydajność procesu adsorpcji.



S04 PS15

Porównanie właściwości fizykochemicznych oraz możliwości zastosowania organicznych emiterów zawierających podstawniki tiofenowe i 2,2'-bitiofenowe

Agnieszka Krawiec ^a, Nathan Béghin ^b, Michał Filapek ^a, Claudia Wilfinger ^b, Lionel Rechainat ^c, Karol Erfurt ^d, Cyrille Monnereau ^e, Clement Cabanetos ^b, Maxime Rémond ^b, Sławomir Kula ^a

^a Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych, Instytut Chemii, Szkolna 9, 40-300 Katowice, Polska

^b Univ Angers, CNRS, MOLTECH-ANJOU, SFR MATRIX, Angers, Francja

^c Univ Limoges, XLIM, UMR 7252, Limoges, Francja

^d Katedra Technologii Chemicznej Organicznej i Petrochemii, Wydział Chemii, Politechnika Śląska, Krzywoustego 9, 44-100 Gliwice, Polska

^e ENS de Lyon, CNRS, Laboratoire de Chimie, UMR 5182, Lyon, Francja
agnieszka.krawiec@us.edu.pl

Pochodne tiofenu oraz imidazolu należą do jednych z najważniejszych grup związków heterocyklicznych wykorzystywanych we współczesnej chemii materiałowej. Dzięki korzystnym właściwościom fizykochemicznym znalazły one szerokie zastosowanie w elektronice organicznej i fotowoltaice [1,2]. Dodatkową zaletą wspomnianych pochodnych są ogromne możliwości funkcjonalizacji tego typu układów, dzięki czemu można dostrajać ich właściwości fizykochemiczne do stawianych wymagań [3]. Niezwykle interesującą możliwością wykorzystania obydwu wspomnianych heterocykli są pochodne fenantro[9,10-d]imidazolu, w których pierścień tiofenu z powodzeniem może pełnić rolę podstawnika.

Biorąc pod uwagę powyższe nadrzędnym celem pracy było określenie wpływu pierścieni tiofenowych w strukturach pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu na ich właściwości fizykochemiczne oraz możliwości zastosowania jako materiały emisyjne. W ramach badań otrzymaliśmy sześć nowych pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu zawierających podstawnik tiofenowy lub 2,2'-bitiofenowy w pozycji C2 pierścienia imidazolu. Dla wszystkich zsyntetyzowanych związków przeprowadziliśmy badania termiczne, optyczne i elektrochemiczne. W oparciu o wyznaczone parametry fizykochemiczne zbadaliśmy wybrane pochodne jako materiały emisyjne w organicznych diodach elektroluminescencyjnych (OLED) oraz ogniwach elektrochemicznych emitujących światło (LEC).

Związki wykorzystane w diodach OLED emitowały głęboko niebieskie światło o parametrach zbliżonych do standardu Broadcast Television Service 2020 (BT.2020). Z kolei ogniwa LEC oparte na jonowych pochodnych wykazywały niższą intensywność emisji oraz wyraźne przesunięcie widma elektroluminescencji w kierunku czerwieni. Uzyskane wyniki pozwoliły wyjaśnić wpływ modyfikacji struktury pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu na ich właściwości termiczne, optyczne, elektrochemiczne i elektroluminescencyjne. Pozyskana wiedza stanowi cenną podstawę do projektowania nowych materiałów emisyjnych przeznaczonych do zastosowań w urządzeniach optoelektronicznych takich jak OLED czy LEC.

1. Dai, Y.; Xu, J.; Lei, X.; Meng, Q.-Y.; Qiao, J. Molecular Engineering of Donor/ π -Bridge Enables High-Efficiency and Long-Lifetime Near-Infrared TADF-OLEDs. *Advanced Functional Materials* 2025, 35, 2412780.
2. Huang, H.; Li, Y.; Zeng, C.; Chen, J.; Liu, M.; Wu, H. Advances in Organic Synthesis and Properties Based On Tetraphenylimidazole Derivatives. *Journal of Fluorescence* 2025, 35, 10595–10611.
3. Szłapa-Kula, A.; Kula, S. Progress on Phenanthroimidazole Derivatives for Light-Emitting Electrochemical Cells: An Overview. *Energies* 2023, 16, 5194, doi:10.3390/en16135194.



S04 PS16

Właściwości fizykochemiczne sorbentów węglowych otrzymywanych z popiołu HOFA w procesie aktywacji fizycznej ditlenkiem węgla

Witold Krumplewski, Dorota Paluch, Robert Wolski, Robert Pietrzak

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej,
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań,

witkru@st.amu.edu.pl

Popiół, powstający podczas spalania ciężkich frakcji ropy naftowej (*ang. heavy oil fly ash - HOFA*), jest niebezpiecznym odpadem przemysłowym, wytwarzanym na całym świecie w milionach ton m.in. w: rafineriach, elektrowniach oraz zakładach odsalania wody. Z uwagi na dużą zawartość węgla pierwiastkowego, z popiołu HOFA można otrzymać węgiel aktywny w procesie wysokotemperaturowej aktywacji fizycznej lub chemicznej.

HOFA, pochodzący z polskich rafinerii, dostarczony przez Re-Solve (Malbork, Poland), aktywowano fizycznie ditlenkiem węgla. Przed procesami aktywacji surowy materiał poddano wodnej ekstrakcji rozpuszczalnych składników. Ekstrakcję prowadzono w warunkach kwaśnych, a pozostałość poekstrakcyjną przemycano wodą aż do momentu, gdy przewodność właściwa wody popłuczynowej spadła poniżej 3 mS. Procesy aktywacji fizycznej przeprowadzano w piecu rurowym w temperaturze 900°C i 1000°C w czasie 2 h i 3 h z narostem temperatury 10°C/min i szybkością przepływu CO₂ 250 mL/min. Otrzymano adsorbenty węglowe o powierzchni właściwej BET od 62 do 250 m²/g. Następnie przeprowadzono charakterystykę właściwości fizykochemicznych otrzymanych sorbentów węglowych. Morfologię cząstek zbadano przy pomocy mikroskopii elektronowej SEM (*ang. scanning electron microscope-SEM*). Rozkład ich wielkości wyznaczono metodą DLS (z *ang. Dynamic Light Scattering-DLS*), a skład elementarny i fazowy metodą ICP-OES i XRD (*ang. Inductively Coupled Plasma Optical Emission Spectrometry-ICP-OES i X-ray diffraction-XRD*). Właściwości chemiczne powierzchni określono metodą XPS (*ang. X-Ray Photoelectron Spectroscopy-XPS*), natomiast właściwości teksturalne zbadano metodą BET.

Sorbent węglowy o największej całkowitej powierzchni BET, ok. 250 m²/g, powierzchni właściwej mikroporów ok. 26 m²/g i objętości mikroporów 0,014 cm³/g, otrzymano w procesie aktywacji fizycznej ditlenkiem węgla w temperaturze 1000°C w czasie dwóch godzin. Cząstki nieaktywowanego i aktywowanego ditlenkiem węgla HOFA wykazują polidispersyjną morfologię i charakteryzują się unimodalnym rozkładem wielkości cząstek (główna frakcja 20–200 μm). Stanowią sferoidalne, makroporowate cenosfery oraz gąbczaste, nieregularne cząstki, których geometria nie ulega zmianie pod wpływem aktywacji fizycznej ditlenkiem węgla w temperaturze 900°C i 1000°C. W fazie mineralnej cząstek HOFA i aktywowanego HOFA dominują pierwiastki bloku d układu okresowego. Pierwiastki o największym stężeniu to odpowiednio: wanad, żelazo i nikiel. Aktywacja fizyczna HOFA powoduje dyfuzję i wydzielanie pierwiastków metalicznych z amorficznej matrycy, prowadząc do krystalizacji in situ mieszanej fazy spineli (V,Fe,Ni)₃O₄. W procesie aktywacji na powierzchni cząstek HOFA powstają trwałe formy tlenkowe metali bloku d układu okresowego m.in.: wanadu i molibdenu o mieszanych stopniach utlenienia, które mogą stanowić aktywne miejsca adsorpcyjne.



S04 PS17

Opracowanie metody wytwarzania materiałów na bazie stopów tytanu warunkujących modyfikacje białkami/peptydami dla zastosowań medycznych

Igor Mossur¹, Beata Kolesińska¹, Anna Jędrzejczak²

¹*Instytut Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny Politechniki Łódzkiej, ul. Żeromskiego 114, 90-543 Łódź;* ²*Instytut Inżynierii Materiałowej, Wydział Mechaniczny Politechniki Łódzkiej, ul. Stefanowskiego 1/15 90-537 Łódź*

256169@edu.p.lodz.pl

Biomateriały na bazie stopów tytanu wykazujące wysoką biozgodność odgrywają kluczową rolę w rozwoju nowoczesnej medycyny, w szczególności w inżynierii tkanek miękkich oraz w regeneracji naczyń krwionośnych. Powłoki węglowe typu DLC (ang. Diamond-Like Carbon) stanowią uniwersalną klasę materiałów ochronnych, których właściwości fizykochemiczne mogą być precyzyjnie modulowane w procesie syntezy. Wyniki naszych wcześniejszych badań wykazały, że nanodiamenty oraz inne nanomateriały węglowe mogą być z powodzeniem funkcjonalizowane cząsteczkami leków [1].

W ramach prowadzonych badań otrzymano podłoża ze stopu tytanu z naniesionymi powłokami ochronnymi DLC poprawiającymi biokompatybilność. Otrzymane materiały tytanowe z powłoką DLC poddano analizie składu chemicznego, morfologii oraz topografii przy użyciu metod takich jak EDS, spektroskopia Ramana oraz badania mikroskopowe. Powierzchnia stopów tytanu nie zapewnia optymalnych warunków do zaawansowanych interakcji biologicznych (mimikujących warunki fizjologiczne). Dopiero ich modyfikacja warstwami węglowymi warunkuje podwyższoną biokompatybilność, co tworzy doskonałą platformę do badania zależności między stanem powierzchni a efektywnością osadzania powłok białkowych i peptydowych, które będą w stanie mimikować środowisko panujące w organizmie żywym. Ponadto, domieszkowanie powłok innymi pierwiastkami pozwala w dalszym stopniu modulować odpowiedź biologiczną powierzchni. Celem niniejszych badań było systematyczne określenie wpływu powłoki DLC domieszkowanej Ag, Ti oraz F na właściwości adhezyjne i funkcjonalne biomateriałów w cieple stałym. Aby zbadać te zależności, zaprojektowano i wytworzono zróżnicowaną bibliotekę próbek tytanowych, które docelowo sfunkcjonalizowano odpowiednio dobranymi fragmentami białek macierzy zewnątrzkomórkowej (fragmenty kolagenu i elastyny) oraz czynnikami wzrostu (EGF i VEGF). Analiza właściwości fizykochemicznych oraz badań strukturalnych wykazała, że przy stałym nośniku bazowym, jakim jest stop tytanu, to morfologia i struktura chemiczna powłoki węglowej determinują ostateczne parametry powierzchniowe układu. Stwierdzono, że skład chemiczny wytworzonych warstw ochronnych pozwalają na skuteczne modulowanie oddziaływań ze środowiskiem biologicznym. Kluczową rolę w procesie integracji cząsteczek biologicznych odgrywa skład chemiczny i struktura chemiczna, warunkujące sposób połączenia. Zróżnicowane oddziaływania na granicy faz i tworzenie stabilnej warstwy peptydowej/białkowej bezpośrednio wpływają na odpowiedź kolonii komórkowych in vitro, co bezpośrednio przekłada się na wzmocnione właściwości funkcjonalne badanych materiałów hybrydowych.

[1] a) Frączyk J., Rosowski A., **Kolesińska B.**, Koperkiewicz A., Sobczyk-Guzenda A., Kaminski Z.J. Dudek M., „Orthogonal Functionalization of Nanodiamond Particles after Laser Modification and Treatment with Aromatic Amine Derivatives” *Nanomaterials*, **8**, 908, doi:10.3390/nano8110908 (2018); b) Mitura K., Kornacka J., Kopczyńska E., Kalisz J., Czerwińska E., Affeltowicz M., Kaczorowski W., **Kolesińska B.**, Frączyk J., Bakalova T., Svobodová L., Louda P., „Active Carbon-Based Nanomaterials in Food Packaging” *Coatings*, **11**, 161, doi.org/10.3390/coatings11020161 (2021).



S04 PS18

Fotochemiczne otrzymywanie hybrydowych hydrożeli żelatyna/PEGDA modyfikowanych kwasem mlekowym do zastosowań biomedycznych

Sonia Kudłacik-Kramarczyk¹, Alicja Przybyłowicz¹, Weronika Kieres¹, Tymoteusz Daniel¹, Dominika Blicharska¹, Małgorzata Nattich-Rak¹, Maja Grabacka², Magdalena Krystyan², Marcel Krzan¹

¹ Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk
ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków

² Wydział Technologii Żywności, Uniwersytet Rolniczy w Krakowie,
ul. Balicka 122, 30-149 Kraków
e-mail: marcel.krzan@ikifp.edu.pl

Celem pracy było otrzymanie nowej serii hybrydowych biomateriałów na bazie żelatyny wołowej oraz diakrylanu poli(glikolu etylenowego) (PEGDA) modyfikowanych kwasem mlekowym (LA). Syntezę przeprowadzono metodą fotopolimeryzacji rodnikowej indukowanej promieniowaniem UV (czas: 5 min) w obecności 2-hydroksy-2-metylopropiofenonu jako fotoinicjatora. Układy przedpolimeryzacyjne oraz gotowe hydrożele poddano kompleksowej analizie fizykochemicznej (Multiscan MS20, reologia, SEM, FT-IR ATR, CIELab, test ściskania, pęcznienie i profil pH w płynach symulowanych) oraz ocenie cytotoksyczności in vitro wobec linii HaCaT i P388D1.

Badania Multiscan wykazały, że dodatek kwasu mlekowego drastycznie zwiększa jednorodność i klarowność mieszanin (transmisja >90% vs <20% dla prób referencyjnych). Obecność LA w strukturze hydrożelu systematycznie obniżała zdolność pęcznienia, co sprzyja stabilności wymiarowej materiału. Analiza mechaniczna dowiodła synergistycznego wpływu stężenia modyfikatora i fotoinicjatora na twardość żeli – wariant zawierający 2 ml LA i 25 µl inicjatora charakteryzował się najwyższą twardością (72,87±2,01 N). Kluczowe okazały się testy biologiczne: matryce pozbawione LA wykazały silny efekt cytotoksyczny (przeżywalność komórek <15%), podczas gdy wprowadzenie kwasu mlekowego pozwoliło na uzyskanie materiałów wysoce biokompatybilnych, zapewniających przeżywalność komórek na poziomie do 88%.

Opracowane kompozycje hydrożelowe (w szczególności Gel_2LA_25Foto i Gel_2LA_15Foto) stanowią wysoce obiecującą bazę do tworzenia bioaktywnych powłok implantologicznych lub nowoczesnych opatrunków medycznych.

Podziękowania

Niniejsze badania uzyskały finansowanie ze środków Narodowego Centrum Nauki (SONATA 2024/55/D/ST8/00703).



S04 PS19

Od fusów kawowych do żywic alkidowych – powłoki na bazie oleju kawowego

Maksymilian Kukuć^{1,2}, Andrzej Plichta¹, Anna Iuliano¹, Paula Bardadyn²

¹Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii i Technologii Polimerów

ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa, maksymilian.kukuc.dokt@pw.edu.pl

²EcoBean Sp. z o.o. ul. Koszykowa 75, 00-662 Warszawa, m.kukuc@ecobean.pl

Dynamicznie rosnąca konsumpcja kawy generuje duże strumienie fusów, w Europie codziennie powstaje 9000 ton odpadowych fusów kawowych (SCG). Produkcja 1 kg kawy generuje 17 kg CO₂, co czyni SCG wyzwaniem środowiskowym, ale jednocześnie potencjalnym surowcem do recyklingu. Recykling SCG umożliwia ponowne wykorzystanie emisji CO₂, wspierając dekarbonizację w przemyśle kawowym i chemicznym.

Olej kawowy, stanowiący 15–30% masy SCG, jest bogaty w kwasy tłuszczowe i dotychczas był wykorzystywany głównie do produkcji biodiesla. Jednak ze względu na jego wysoką wartość, wykorzystanie oleju kawowego wyłącznie do spalania jest nieefektywne. W niniejszych badaniach proponowane jest alternatywne podejście: wykorzystanie oleju z SCG jako surowca w syntezie żywic alkidowych przeznaczonych do zastosowań powłokowych.

Żywice alkidowe należą do kluczowej grupy spoiw stosowanych w farbách i lakierach dzięki dobrej zwilżalności podłoża, zdolności do sieciowania na powietrzu oraz korzystnym właściwościom reologicznym. Klasycznie wytwarzane na bazie olejów spożywczych takich jak lniany czy sojowy, a także surowców petrochemicznych, budzą wątpliwości w kontekście konkurencji z sektorem żywności i trwałej zależności od surowców kopalnych. Zastąpienie części konwencjonalnych tłuszczów olejem kawowym pochodzącym z recyklingu odpadów, pozwala zwiększyć udział surowców odnawialnych w formułacjach alkidowych bez konieczności rezygnowania z wymaganych parametrów użytkowych.

W pracy zbadano syntezę żywic alkidowych z oleju SCG, glicerolu i bezwodnika ftalowego oraz wpływ zasadowego katalizatora Mg(OH)₂ na przebieg kondensacji i właściwości uzyskanych powłok. Syntezę prowadzono w dwuetapowym procesie: etap 1) gliceroliza oleju kawowego w zakresie temperatur 180–220 °C oraz etap 2) kondensacja uzyskanego w etapie 1 glicerolizatu z bezwodnikiem ftalowym w 240 °C, przy zawartości Mg(OH)₂ 0,1–1,0% mas. i czasie glicerolizy 1–3 h. Charakterystyka żywic obejmowała oznaczenie liczby kwasowej i hydroksylowej, pomiar lepkości, wyznaczenie Mn i Mw metodą chromatografii żelowej (GPC) oraz ocenę twardości względnej powłok po utwardzeniu.



S04 PS20

Jak zmiana podstawnika aromatycznego w pozycji C2 wpływa na wybrane właściwości fizykochemiczne oraz możliwości zastosowania pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu w OLED

Sławomir Kula^a, Agnieszka Krawiec^a, Jaijanarthan Lingagouder^b,
Agata Szłapa-Kula^a, Michał Filapek^a, Karol Erfurt^c, Przemysław Data^{b,d}

^a Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych, Instytut Chemii,
Szkołna 9, 40-007 Katowice, Polska

^b Politechnika Łódzka, Wydział Chemii, Katedra Fizyki Molekularnej, 90-543 Łódź, Poland

^c Politechnika Śląska, Wydział Chemii, Katedra Technologii Chemicznej oraz Petrochemii, B.
Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice, Poland

^d Durham University, Department of Physics, South Road, Durham DH1 3LE, United Kingdom

Czy liczba pierścieni aromatycznych w podstawniku może mieć wpływ na finalne właściwości oraz możliwości zastosowania w OLED takich związków jak pochodne fenantro[9,10-d]imidazolu? Ponadto czy sposób ułożenia pierścieni aromatycznych oraz pozycja przyłączenia podstawnika do rdzenia cząsteczki również ma znaczenie? Aby odpowiedzieć na powyższe pytania otrzymaliśmy w reakcji kondensacji dziesięć pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu (0A – 0J) zróżnicowanych między sobą pod względem aromatycznych podstawników w pozycji C2 [1]. Podstawniki aromatyczne dobrano tak aby ich charakter w aspekcie liczby pierścieni zmieniał się narastająco w następującej kolejności: fenyl (0A), bifenyl-1-yl (0B), naftalen-1-yl (0C), naftalen-2-yl (0D), antracen-9-yl (0E), fenantren-9-yl (0F), antracen-2-yl (0G), trifenylen-2-yl (0H), piren-1-yl (0I) oraz perylen-3-yl (0J) [1]. Następnie dla wszystkich otrzymanych związków przeprowadzono badania termiczne, elektrochemiczne oraz optyczne, w celu oceny przydatności ich pod kątem zastosowania w OLED. Pod względem właściwości termicznych wszystkie pochodne fenantro[9,10-d]imidazolu wykazują stabilność termiczną powyżej 290°C. Jednakże parametr ten nie rośnie wykładniczo wraz ze wzrostem liczby pierścieni aromatycznych w podstawniku. Jest on przede wszystkim związany z ich rozmieszczeniem i pozycją przyłączenia do rdzenia fenantro[9,10-d]imidazolu. Badania elektrochemiczne wykazały, że proces utleniania zachodził najłatwiej dla cząsteczek 0E, 0G, 0I i 0J. Pozostałe pochodne utleniały się powyżej 0,5 V. Proces redukcji zachodził przy potencjałach poniżej 2 V. Badania fotofizyczne i elektroluminescencyjne dowiodły, że kolor emisji oraz wydajność urządzeń skonstruowanych w oparciu o otrzymane pochodne fenantro[9,10-d]imidazolu można skutecznie dostosować, zmieniając podstawnik aromatyczny w pozycji C2. Najlepszą wydajność OLED uzyskano dla pochodnej perylenu 0J, podczas gdy 0E i 0I były również jednymi z bardziej obiecujących emiterów w serii. Co ważne, samo zwiększenie liczby pierścieni aromatycznych w podstawniku C2 nie wystarczy do poprawy parametrów urządzenia. Bardzo duże znaczenie ma układ pierścieni, pozycja przyłączenia do rdzenia oraz wynikający z tego kąt skręcenia.

Literatura:

1. Krawiec, A.; Lingagouder, J.; Szłapa-Kula, A.; Filapek, M.; Erfurt, K.; Data, P.; Kula, S. Effect of Aromatic Ring Number and Substituent Arrangement on the Properties of Phenanthro[9,10-d]Imidazole Derivatives for OLEDs. *Journal of Materials Chemistry C* 2026, doi:10.1039/D6TC00518G.



S04 PS21

Właściwości zwilżające wodnego ekstraktu z mydlnicy lekarskiej

Anna Zdziennicka, Katarzyna Szymczyk, Bronisław Jańczuk

Katedra Zjawisk Międzyfazowych, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii,

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie

e-mail: anna.zdziennicka@mail.umcs.pl

Ekstrakty roślinne są mieszaniną różnorodnych związków o różnej aktywności powierzchniowej. Dodatkowo skład ekstraktu zależy od gatunku rośliny, jej części użytych do ekstrakcji oraz samej metody prowadzenia tego procesu. Mydlnica lekarska (*Saponaria officinalis* L.) jest jednym z najbogatszych źródeł saponin występujących we wszystkich organach tej rośliny. Jednakże zdecydowanie najpopularniejszym źródłem saponin wykorzystywanych w przemyśle farmaceutycznym, kosmetycznym i spożywczym są korzenie mydlnicy.

W zastosowaniu saponin istotną rolę odgrywają ich właściwości zwilżające w związku z tym podjęto badania mające na celu określenie tych właściwości ekstraktu uzyskanego w wyniku gotowania korzeni mydlnicy w wodzie (SE). Cel ten zrealizowano poprzez pomiary kąta zwilżania wodnych roztworów SE na powierzchni ciał stałych. W badaniach wykorzystano materiały modelowe: apolarny politetrafluoroetylen (PTFE), monopolarny poli(metakrylan metylu) (PMMA) oraz bipolarny – kwarc. Ponadto pomiary przeprowadzono dla kompozytów o słabych właściwościach bipolarnych wytworzonych na bazie diakrylanu bisfenolu A (BPA.DA) i N-winylo-2-pirolidonu (NVP) z dodatkiem celulozy (CEL) oraz chitozanu (CHI) jako wypełniaczy ekologicznych [1].

W oparciu o otrzymane minimalne wartości kąta zwilżania wodnych roztworów ekstraktu z mydlnicy lekarskiej bogatego w saponiny na powierzchniach zastosowanych w badaniach ciał stałych wyciągnięto wnioski, że SE jest na ogół słabym środkiem zwilżającym. Dodatkowo uzyskane wyniki przeanalizowano w funkcji napięcia powierzchniowego wodnego roztworu SE oraz ciał stałych, a także w odniesieniu do zależności między kątem zwilżania a adsorpcją SE na granicach faz ciało stałe-roztwór i ciało stałe-powietrze. Stwierdzono między innymi, że na podstawie składników i parametrów napięcia powierzchniowego ciał stałych oraz cieczy możliwe jest przewidywanie izoterm kąta zwilżania, pod warunkiem że poza kroplą roztworu osadzoną na danym ciele stałym nie powstaje warstwa adsorpcyjna mogąca obniżyć napięcie powierzchniowe tego ciała. Ponadto wyznaczono energię swobodną Gibbsa adsorpcji SE na granicach faz ciało stałe-roztwór oraz ciało stałe-powietrze i porównano ją z wartością odpowiadającą granicy faz roztwór-powietrze [2].

[1] A. Zdziennicka, K. Szymczyk, B. Jańczuk, K. Wojciechowski, E. Kobylska *Molecules* 2025, 30(16), 3413.

[2] A. Zdziennicka, K. Szymczyk, B. Jańczuk, K. Wojciechowski, E. Kobylska, *J. Mol. Liq.* 2025, 435, 128148.

Modyfikacja terpolimeru ABS w celu poprawy właściwości użytkowych i odporności ogniowej

Katarzyna Bulanda, Rafał Oliwa, Mariusz Oleksy

*Afiliacja; Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza, Wydział Chemiczny, Katedra Kompozytów Polimerowych, Aleja Powstańców Warszawy 6/Budynek H, 35-029 Rzeszów
e-mail: k.bulanda@prz.edu.pl*

Kopolimer akrylonitrylo-butadieno-styrenowy (ABS) jest jednym z najczęściej stosowanych tworzyw termoplastycznych w technologiach szybkiego prototypowania oraz druku 3D metodą FDM/FFF. Dzięki korzystnym właściwościom mechanicznym znajduje szerokie zastosowanie w produkcji elementów funkcjonalnych i prototypowych. Istotnym ograniczeniem jego wykorzystania pozostaje jednak wysoka palność, dlatego poprawa właściwości ogniowych ABS poprzez zastosowanie środków zmniejszających palność stanowi ważny kierunek badań. Szczególnie obiecujące są bezhalogenowe dodatki, takie jak boran cynku (ZB), polifosforan melaminy (MPP) oraz mieszaninę fosforanów organicznych i pirofosforanów - Exolit (E), które wykazują synergiczne działanie w ograniczaniu procesu spalania.

W niniejszej pracy zbadano wpływ boranu cynku (ZB), polifosforanu melaminy (MPP) oraz Exolitu (E), stosowanych indywidualnie i w układach hybrydowych, na właściwości ogniowe kompozytów ABS. Oceniono wpływ dodatków na właściwości ogniowe kompozytów, w tym parametry spalania, graniczny indeks tlenowy (LOI), klasyfikację UL-94 oraz wskaźniki bezpieczeństwa pożarowego.

W przypadku kompozytów zawierających ZB i MPP dodatek uniepalniaczy zwiększył wartość LOI z 17,9% dla niemodyfikowanego ABS do 19,5% dla kompozytu ABS/ZB5%/MPP15% oraz wydłużył czas spalania w teście UL-94. Najwyższą skuteczność wykazał kompozyt ABS/ZB5%/MPP15%, dla którego czas spalania wyniósł 107 s, a liniowa szybkość spalania zmniejszyła się do 42,06 mm/min. Analiza mikrokalorymetrii stożkowej wykazała obniżenie parametrów HRR, pHRR i THR oraz poprawę wskaźników MARHE, FIGRA, FPI i FRI. Najkorzystniejsze parametry spalania uzyskano dla kompozytów ABS/ZB20% oraz ABS/ZB10%/MPP10%. Stwierdzono również, że wzrost zawartości ZB zwiększa efekt zwęglania, natomiast największą zdolność do tworzenia ochronnej warstwy wykazywał kompozyt ABS/ZB10%/MPP10%.

W przypadku kompozytów zawierających ZB i Exolit zastosowanie dodatków powodowało stopniowe obniżenie masowego wskaźnika szybkości płynięcia (MFR), przy jednoczesnym zachowaniu jednorodnej mikrostruktury materiału. Największą poprawę właściwości ogniowych wykazał kompozyt ABS/ZB5%/E15%, dla którego średnia szybkość wydzielania ciepła (HRR) zmniejszyła się z 356,43 do 64,09 kW/m², a maksymalna szybkość wydzielania ciepła (pHRR) z 1285,22 do 179,19 kW/m². Wszystkie badane kompozyty charakteryzowały się również niższymi wartościami THR i EHC w porównaniu z niemodyfikowanym ABS. Najwyższą wartość LOI (33,6%) uzyskano dla kompozytu ABS/ZB5%/E15%, natomiast próbki ABS/ZB15%/E5%, ABS/ZB10%/E10% i ABS/ZB5%/E15% uzyskały klasę palności HB40. Analiza wskaźników FIGRA, FPI i FRI potwierdziła skuteczne ograniczenie rozwoju pożaru, przy czym najlepsze wartości uzyskał kompozyt ABS/ZB15%/E5%.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że odpowiedni dobór i wzajemne proporcje bezhalogenowych środków zmniejszających palność umożliwiają skuteczną poprawę właściwości ogniowych kompozytów ABS przeznaczonych do zastosowań w technologii druku 3D.

Badania dofinansowano ze środków Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach Programu „Regionalna Inicjatywa Doskonałości”, nr umowy RID/SP/0032/2024/01.



S04 PS23

Nanobentonit jako modyfikator tworzyw polimerowych

Sławomir Wilczewski, Joanna Kowalik, Anna Zalewska, Magdalena Tworek,
Przemysław Siekierka, Jolanta Tomaszewska

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich; Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej;
Zakład Technologii Polimerów i Powłok Ochronnych
ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz
e-mail: slawomir.wilczewski@pbs.edu.pl*

Bentonit, ze względu na swoją charakterystyczną strukturę, właściwości powierzchniowe oraz możliwość modyfikacji i funkcjonalizacji, stanowi interesujący materiał do kształtowania właściwości układów polimerowych. Szczególne możliwości w tym zakresie stwarza zastosowanie bentonitu w postaci nanometrycznej, pozwalające na jego efektywne oddziaływanie z osnową polimerową. Celem prowadzonych badań była ocena możliwości wykorzystania bentonitu i nanobentonitu jako funkcjonalnych modyfikatorów materiałów na bazie poli(chlorku winylu) (PVC) oraz wodnych dyspersji akrylowych, ze szczególnym uwzględnieniem ich wpływu na strukturę, właściwości mechaniczne, stabilność oraz zdolności sorpcyjne otrzymanych materiałów.

Pierwszym obszarem prezentowanych badań nad wykorzystaniem nanobentonitu do modyfikacji tworzyw polimerowych było opracowanie membran na bazie plastizolu PVC modyfikowanego nanobentonitem z osadzonymi nanocząstkami srebra (AgNP). Obecność AgNP potwierdzono metodą UV-vis, natomiast morfologię kompozytów oceniono za pomocą SEM. Wykazano, że wzrost zawartości modyfikatora prowadził do obniżenia wytrzymałości przy zerwaniu o około 30–35% względem niemodyfikowanego plastizolu PVC. Przy zawartości 1–2% bentonitu wydłużenie maksymalne zmniejszało się o około 30%, natomiast przy wyższych stężeniach spadek sięgał 60%, co wiązano z powstawaniem aglomeratów i trudnościami w równomiernym rozprowadzeniu bentonitu. Za optymalną zawartość modyfikatora uznano 1,5%.

W kolejnym obszarze badań oceniono możliwość wykorzystania nanobentonitu (nB) jako nieorganicznego zagęszczacza i stabilizatora wodnych dyspersji akrylowych. Badania przeprowadzono dla układów na bazie dyspersji Primal IW3311 zawierających 0,5 g bentonitu oraz niejonowe środki powierzchniowo czynne Rokanol T18 lub Rokanol L10, których zawartość zmieniano w zakresie 2–10% względem polimeru. Wykazano, że obecność bentonitu w połączeniu z odpowiednio dobranym surfaktantem pozwala na ograniczenie procesów destabilizacji dyspersji, przy czym efekt ten był wyraźnie zależny od rodzaju i stężenia środka powierzchniowo czynnego. Najkorzystniejsze rezultaty uzyskano dla układów zawierających 6–8% Rokanolu T18, natomiast w przypadku Rokanolu L10 najwyższą stabilność wykazywała kompozycja z jego 8% dodatkiem.

Oceniono również możliwość zastosowania nanobentonitu jako nanonapełniacza elektroprzędzonych włókien na osnowie nieplastyfikowanego PVC (PVC-R). Dodatek 1% nB zmniejszał średnicę włókien PVC-R z 1,7 do 1,2 μm oraz ich porowatość z 89,5 do 74,3%. Szczególnie korzystne rezultaty uzyskano w zakresie właściwości sorpcyjnych PVC-R zawierającego 1% nB, dla którego chłonność oleju napędowego, rzepakowego i mineralnego oleju silnikowego wynosiła odpowiednio 10,8, 13,3 i 21,2 g/g. Jednocześnie obecność nB nie powodowała istotnego pogorszenia stabilności termicznej materiałów.

Uzyskane wyniki wskazują na szerokie możliwości wykorzystania nanobentonitu w modyfikacji układów polimerowych. W zależności od postaci, zawartości i sposobu funkcjonalizacji może on pełnić funkcję nośnika nanocząstek, stabilizatora układów dyspersyjnych oraz funkcjonalnego nanonapełniacza kształtującego strukturę i właściwości sorpcyjne materiałów polimerowych. Kluczowe znaczenie ma odpowiedni dobór zawartości modyfikatora oraz zapewnienie jego równomiernej dyspersji w osnowie polimerowej.



S04 PS24

Wpływ składu kompozycji surfaktantów na jakość specjalistycznych detergentów przeznaczonych do usuwania pozostałości pestycydów z powierzchni owoców i warzyw

Tomasz Wasilewski^{*1,2}, Zofia Hordyjewicz-Baran³, Marcin Łukaszewicz²

¹Uniwersytet Radomski im. Kazimierza Pułaskiego w Radomiu, Chrobrego 7, 26-600 Radom

²InventionBio S.A., Jakóba Hechlińskiego 4, 85-825 Bydgoszcz

³Sieć Badawcza Łukasiewicz – Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Chemii Surowców Odnawialnych, Energetyków 9, 47-225 Kędzierzyn-Koźle
tomasz.wasilewski@urad.edu.pl

W ostatnich latach obserwuje się istotny wzrost zainteresowania bezpieczeństwem żywności, w tym koniecznością dokładnego mycia owoców i warzyw przed spożyciem. Zabieg ten umożliwia skuteczne usuwanie substancji potencjalnie szkodliwych dla zdrowia, takich jak pozostałości środków ochrony roślin, powłoki woskowe oraz zanieczyszczenia pochodzące ze środowiska. Preparaty codziennego użytku przeznaczone do mycia produktów roślinnych powinny łączyć wysoką skuteczność działania z bezpieczeństwem użytkowania. W związku z tym istotne jest opracowywanie specjalistycznych środków myjących odpowiadających na rosnące wymagania konsumentów.

Celem pracy było określenie wpływu składu kompozycji surfaktantów na jakość detergentów przeznaczonych do usuwania pozostałości pestycydów z powierzchni owoców i warzyw. Podstawą projektowania formułacji było wykorzystanie specyficznych właściwości surfaktantów niejonowych w środowisku wodnym, związanych z istotnym wzrostem ich aktywności powierzchniowej w pobliżu temperatury zmętnienia. Zjawisko to prowadzi do zwiększenia zdolności solubilizacyjnych układu, a tym samym do poprawy skuteczności usuwania trudno rozpuszczalnych zanieczyszczeń organicznych.

Istotnym elementem badań była również ocena parametrów związanych z bezpieczeństwem stosowania opracowanych środków myjących. Opracowano preparaty charakteryzujące się wysoką skutecznością mycia przy jednoczesnym ograniczeniu niekorzystnego wpływu na skórę użytkownika, w tym działania drażniącego i wysuszającego. Takie połączenie funkcjonalności i bezpieczeństwa wpisuje się we współczesne oczekiwania konsumentów wobec produktów przeznaczonych do codziennego użytku.

Przeprowadzone badania wykazały istotny wpływ rodzaju i stężenia surfaktantów na efektywność procesu mycia. Odpowiednio dobrane kompozycje umożliwiły uzyskanie środków myjących zapewniających wysoką skutecznością usuwania pozostałości pestycydów przy jednoczesnym ograniczeniu potencjalnego działania drażniącego i wysuszającego względem skóry użytkownika. Wyznaczone zależności pomiędzy składem formułacji a właściwościami użytkowymi preparatów stanowią cenne wskazówki w projektowaniu nowoczesnych, bezpiecznych i efektywnych środków do mycia owoców i warzyw.

Podziękowanie: badania współfinansowane przez UE ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Inteligentny Rozwój 2014-2020. Projekt realizowany w ramach konkursu NCBR: Projekty aplikacyjne: POIR.04.01.04-00-0112/19-00.



S04 PS25

Synteza fotoprzełączalnych ligandów umożliwiających samoorganizację i zaawansowaną kontrolę magnetycznych nanocząstek w układach ciekłokrystalicznych

Zuzanna Choińska, Michał Wójcik

*Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii
Zakład Chemii Organicznej i Technologii Chemicznej,
Pracownia Syntezy Nanomateriałów Organicznych;
Zuzanna Choińska;
z.choinska2@student.uw.edu.pl*

Układy ciekłokrystaliczne oparte na nanocząstkach można uzyskać poprzez odpowiednie zaprojektowanie ligandów zakotwiczonych na ich powierzchni. Zastosowanie związków zawierających długie łańcuchy węglowodorowe oraz sztywne rdzenie aromatyczne, połączone z powierzchnią nanocząstki za pomocą elastycznego łącznika kowalencyjnego, umożliwia otrzymanie struktur łączących uporządkowanie i zdolność do samoorganizacji charakterystyczne dla kryształów z płynnością właściwą cieczom.

Celem badania była synteza ligandów, które poza umożliwieniem tworzenia ciekłokrystalicznych struktur supramolekularnych, będą wykazywały również właściwości światłoprzełączalne. Projektowana architektura ligandów ma umożliwiać odwracalną zmianę ich konformacji pod wpływem światła widzialnego, a tym samym zewnętrzną kontrolę organizacji struktur supramolekularnych. Powszechnie wykorzystywane w tym celu pochodne azobenzenowe zmodyfikowano atomami fluoru w pozycjach odpowiednio 1- oraz 3-, osiągając w ten sposób przesunięcie długości fali światła w kierunku długości światła widzialnego. Zaprojektowano także ligand domieszkujący, który ma ułatwić samoorganizację warstwy ciekłokrystalicznej poprzez interakcję z trójczłonowym rdzeniem aromatycznym oraz długim łańcuchem węglowodorowym.

Połączenie światłoprzełączności ligandów z procesem samoorganizacji nanocząstek umożliwi opracowanie dynamicznego, zależnego od światła widzialnego układu ciekłokrystalicznego. Zastosowanie odpowiednio dobranego metalu do syntezy nanocząstek pozwoli dodatkowo na uzyskanie kontrolowanych właściwości magnetycznych, badając możliwość projektowania wielofunkcyjnych materiałów reagujących na bodźce zewnętrzne.

Filamenty do druku 3D o zwiększonej odporności na ogień

Katarzyna Bulanda, Rafał Oliwa, Mariusz Oleksy

*Afiliacja; Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza, Wydział Chemiczny, Katedra Kompozytów Polimerowych, Aleja Powstańców Warszawy 6/Budynek H, 35-029 Rzeszów
e-mail: k.bulanda@prz.edu.pl*

Kopolimer akrylonitrylo-butadieno-styrenowy (ABS) jest jednym z najczęściej stosowanych tworzyw termoplastycznych w zastosowaniach inżynierskich. Ze względu na korzystne właściwości mechaniczne oraz łatwość przetwarzania znajduje szerokie zastosowanie, między innymi w technologii druku 3D metodą osadzania stopionego materiału (FDM/FFF). Istotnym ograniczeniem jego wykorzystania jest jednak wysoka palność oraz skłonność do kapania podczas spalania, co utrudnia spełnienie rygorystycznych wymagań dotyczących bezpieczeństwa pożarowego, takich jak wysoki wskaźnik tlenowy (LOI), klasa palności UL-94 V-0 czy niska szybkość wydzielania ciepła.

Problem ten jest szczególnie istotny w przypadku elementów wytwarzanych metodami przyrostowymi. Technologia FDM, oparta na nakładaniu kolejnych warstw stopionego materiału, prowadzi do powstawania struktur anizotropowych, charakteryzujących się osłabioną adhezją międzywarstwową, obecnością mikropustek oraz niejednorodnym stopniem wypełnienia. Cechy te mogą sprzyjać rozprzestrzenianiu się płomienia oraz wpływać na przebieg spalania i skuteczność mechanizmów uniepalniających zachodzących w fazie gazowej i skondensowanej. Z tego względu poprawa właściwości ogniowych ABS poprzez zastosowanie odpowiednio dobranych środków zmniejszających palność stanowi istotny kierunek badań.

W niniejszej pracy określono wpływ rodzaju oraz zawartości fosforowych środków zmniejszających palność, tj. polifosforanu melaminy (MPP) i dietylofosfinianu glinu (AIDPi), a także ich układów hybrydowych o stosunku MPP:AIDPi wynoszącym 1:1, 1:3 oraz 3:1, na właściwości ogniowe kompozytów na osnowie ABS. Uzyskane wyniki wykazały, że synergiczne oddziaływanie MPP i AIDPi, polegające na jednoczesnym ograniczaniu procesów spalania w fazie gazowej oraz wspomaganiu tworzenia ochronnej warstwy w fazie skondensowanej, znacząco poprawia właściwości ogniowe kompozytów ABS.

Dla niemodyfikowanego ABS maksymalna szybkość wydzielania ciepła (pHRR) oraz całkowita ilość wydzielonego ciepła (THR) wyniosły odpowiednio 808,7 kW/m² i 86,5 MJ/m². Zastosowanie hybrydowego układu uniepalniającego MPP/AIDPi (15/5% mas.) obniżyło te wartości do 292,9 kW/m² oraz 32,3 MJ/m², a efektywne ciepło spalania (EHC) zmniejszyło się z 22,3 do 15,5 MJ/kg, co wskazuje na skuteczne ograniczenie procesów spalania zachodzących w fazie gazowej.

Analiza pozostałości po spalaniu metodą FTIR wykazała obecność związków fosforowych powstających w fazie skondensowanej, potwierdzając udział dodatków uniepalniających w tworzeniu ochronnej warstwy zwęglonej. Spośród badanych materiałów najkorzystniejsze właściwości ogniowe wykazał kompozyt ABS zawierający 15% mas. MPP oraz 5% mas. AIDPi. W badaniach z wykorzystaniem kalorymetru stożkowego charakteryzował się on najniższymi wartościami parametrów opisujących intensywność spalania oraz rozwój pożaru, co potwierdziły korzystne wartości wskaźników: szybkości wzrostu ognia (FIGRA), maksymalnej średniej szybkości emisji ciepła (MARHE), potencjału ogniowego (FPI) oraz ognioodporności (FRI).

Badania dofinansowano ze środków Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach Programu „Regionalna Inicjatywa Doskonałości”, nr umowy RID/SP/0032/2024/01.



S04 PS27

Synteza bio-polioliu na bazie wybranego oleju roślinnego dedykowanego do otrzymywania płyt warstwowych z rdzeniem poliizocyjanurowym (PIR)

Marcin Borowicz, Aleksandra Piotrowska, Joanna Paciorek-Sadowska, Marek Isbrandt
Uniwersytet Kazimierza Wielkiego w Bydgoszczy, Wydział Inżynierii Materiałowej, Katedra Chemii i Technologii Poliuretanów
ul. J.K. Chodkiewicza 30, 85-064 Bydgoszcz
m.borowicz@ukw.edu.pl

Synteza biodegradowalnych biopolioli polega na chemicznym przetworzeniu surowców oleochemicznych jakimi są oleje roślinne do postaci alkoholi wielowodorotlenowych zawierających aktywne grupy hydroksylowe zdolne do reakcji z surowcami izocyjanianowymi celem wytworzenia odpowiednich materiałów poliuretanowych. W syntezie zastosowano wybrany „egozytyczny” olej roślinny zawierający wysoką zawartość nienasyconych kwasów tłuszczowych (NNKT) w swoim składzie. Rozwiązanie przedstawiające wykorzystanie biopolioli na bazie olejów roślinnych dla przemysłu poliuretanowego jest niezwykle ważne ze względu na implementację zasad zrównoważonego rozwoju, które są motorem napędowym wielu firm na terenie Unii Europejskiej, zwłaszcza z sektora chemicznego. Jest to również zbieżne z zasadami Zielonej Chemii, które dążą do eliminacji z procesów produkcyjnych surowców szkodliwych, toksycznych i niebezpiecznych na rzecz surowców bezpiecznych dla zdrowia i życia ludzi oraz środowiska.

Biopoliol na bazie oleju roślinnego otrzymywano w dwuetapowej syntezie. Pierwszy etap polegał na epoksydacji wiązań podwójnych surowca roślinnego za pomocą kwasu nadooctowego wytworzonego *in situ*. Kolejny etap polegał na otwarciu pierścieni epoksydowych za pomocą diolu zawierającego heteroatomy siarki – 2,2'-tiodietanolu. Otrzymany biopoliol poddano badaniom fizykochemicznym takim jak: oznaczenie liczby hydroksylowej, liczby kwasowej, pH, gęstości, lepkości czy zawartości wody. Zbadano również średnią masę cząsteczkową oraz skład pierwiastkowy. Obecność charakterystycznych grup funkcyjnych potwierdzono metodami spektroskopowymi (FTIR, ^1H NMR i ^{13}C NMR).

Węgle aktywne uzyskane z odpadowej biomasy grzybowej jako adsorbenty zanieczyszczeń organicznych

Małgorzata Wiśniewska¹, Barbara Szacon¹, Karina Tokarska¹, Piotr Nowicki²

¹*Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie,
pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin;*

²*Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu,
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;
e-mail: malgorzata.wisniewska@mail.umcs.pl*

Benzen, fenol i dichlorofenol to toksyczne związki organiczne przedostające się do wody w wyniku działalności związanej z przemysłem petrochemicznym, chemicznym i farmaceutycznym. Ich usuwanie jest absolutnie konieczne, ponieważ wykazują silne działanie rakotwórcze, mutagenne oraz drastycznie obniżają jakość życia biologicznego, nadając wodzie m.in. trwały, odpychający zapach i smak. Metoda adsorpcyjna (głównie z użyciem węgla aktywnego) oferuje skuteczny sposób usuwania powyższych związków aromatycznych z fazy ciekłej. Mechanizmy tego procesu opierają się przede wszystkim na słabych siłach międzycząsteczkowych van der Waalsa, oddziaływaniach π - π między aromatycznymi pierścieniami zanieczyszczeń i powierzchniowymi strukturami materiału węglowego, siłach hydrofobowych i tworzeniu wiązań wodorowych przez pochodne benzenu zawierające np. grupy hydroksylowe (fenol).

W przeprowadzonych badaniach do wytworzenia adsorbentów węglowych zastosowano w roli prekursorów pozostałości pochodzące z przetwarzania popularnych w Polsce grzybów jadalnych – podgrzybka zwyczajnego (P) i pieprznika jadalnego, czyli kurki (K). Takie podejście pozwala na ekonomiczne zagospodarowanie odpadowej biomasy leśnej i nadanie jej nowej wartości użytkowej i technologicznej. Wytwarzanie biowęgla aktywnych (A) zrealizowano na drodze aktywacji bezpośredniej przy użyciu tlenku węgla(IV) w temperaturze 750 °C, oraz stosując dwa warianty ogrzewania – konwencjonalny (K) i mikrofalowy (M). Następnie scharakteryzowano uzyskane materiały węglowe (PA_K, PA_M, KA_K i KA_M) pod kątem rozwinięcia ich struktury porowatej i właściwości kwasowo-zasadowych powierzchni, a także parametrów elektrokinetycznych ich wodnych suspensji. Zbadano także efektywność biowęgla aktywnych jako adsorbentów benzenu, fenolu i 2,4-dichlorofenolu z ich roztworów wodnych.

Analiza porównawcza uzyskanych pojemności sorpcyjnych wykazała, że są one na ogół nieco wyższe dla biowęgla aktywnych, które otrzymano w wyniku zastosowania ogrzewania konwencjonalnego. Wyjątek od tej tendencji stanowią wyniki dotyczące benzenu. Największą adsorpcję fenolu stwierdzono dla próbki KA_K (36,8 mg/g), natomiast 2,4-dichlorofenolu – dla próbki PA_K (34,4 mg/g). W przypadku adsorpcji benzenu najbardziej skuteczny okazał się być materiał KA_M, dla którego uzyskano ilość zaadsorbowaną na poziomie 45,1 mg/g. Wyniki te są odzwierciedleniem złożonych mechanizmów wiązania cząsteczek organicznych o różnym charakterze hydrofobowo-hydrofilowym na powierzchni biowęgla aktywnych o silnie zasadowych właściwościach (punkty ładunku zerowego (pzc) położone są w zakresie pH powyżej 11) i mezoporowatej strukturze. Usuwanie benzenu jako cząsteczki wysoce niepolarnej i hydrofobowej opiera się na adsorpcji o charakterze czysto fizycznym. Natomiast dla fenolu i 2,4-dichlorofenolu, zawierających polarną grupę hydroksylową, możliwe jest tworzenie wiązań wodorowych z grupami tlenowymi na powierzchni biowęgla, przez co pewien udział w tym przypadku ma również adsorpcja chemiczna. Wykazano zatem przydatność biowęgla aktywnych w usuwaniu benzenu i jego pochodnych z roztworów wodnych, co ma kluczowe znaczenie nie tylko dla efektywnego i taniego oczyszczania ścieków przemysłowych, ale także rozwoju koncepcji gospodarki o obiegu zamkniętym.

Funkcjonalne poliolefiny jako nowoczesne materiały do zastosowania w inżynierii biomedycznej

Monika Antczak¹, Weronika Nowicka^{1,2}, Wojciech Szot^{1,2}, Rob Duchateau^{2,3}, Lidia Jasińska-Walc^{1,2}

¹Laboratorium Makromolekularnych Materiałów Stosowanych, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk, Polska

²SABIC Technology & Innovation, STC Geleen, Urmonderbaan 22, 6167RD Geleen, Holandia

³Chemical Product Engineering, Department of Chemical Engineering, University of Groningen, Nijenborgh 4, 9747 AG Groningen, Holandia
e-mail: s188800@student.pg.edu.pl

Poliolefiny (PO), obejmujące przede wszystkim polietylen oraz polipropylen (PP), należą do najczęściej stosowanych materiałów polimerowych we współczesnym przemyśle. Ich szerokie wykorzystanie wynika z połączenia korzystnych właściwości użytkowych, takich jak odporność chemiczna, niewielka masa, dobra wytrzymałość mechaniczna, możliwość sterylizacji oraz relatywnie niski koszt produkcji.^{1,4} Dzięki tym cechom materiały te od wielu lat znajdują zastosowanie w obszarze ochrony zdrowia, gdzie szczególne znaczenie mają trwałość materiału, bezpieczeństwo użytkowania oraz łatwość przetwarzania.^{1,4} Istotną rolę odgrywa PP wykorzystywany do produkcji włóknin stosowanych w środkach ochrony indywidualnej, w tym maseczkach medycznych i filtrujących. Materiał ten jest szeroko stosowany ze względu na możliwość tworzenia struktur wykorzystywanych w zastosowaniach filtracyjnych oraz korzystne właściwości użytkowe.¹

Pomimo licznych zalet, rozwój bardziej zaawansowanych zastosowań biomedycznych wymaga dalszej modyfikacji właściwości PO oraz projektowania kompozytów o ściślej kontrolowanych parametrach użytkowych. W odpowiedzi na rosnące wymagania rozwijane są metody funkcjonalizacji i wzmacniania materiałów polimerowych, umożliwiające dostosowywanie ich właściwości do zastosowań specjalistycznych. Procesy te przyczyniają się do wzrostu zainteresowania materiałami polimerowymi przeznaczonymi do zastosowań biomedycznych, obejmujących m.in. inżynierię tkankową, biomateriały oraz nowoczesne rozwiązania medyczne.^{2,3} Dynamiczny rozwój badań nad funkcjonalizowanymi materiałami polimerowymi wskazuje, że kontrolowana modyfikacja ich właściwości może zwiększać zakres ich potencjalnych zastosowań biomedycznych. Połączenie trwałości charakterystycznej dla tradycyjnych PO z możliwością ukierunkowanej modyfikacji właściwości stwarza perspektywę opracowywania materiałów odpowiadających rosnącym wymaganiom współczesnych technologii medycznych. Możliwość kontrolowanej modyfikacji właściwości materiałów polimerowych wskazuje, że materiały te mogą stanowić obiecujący kierunek rozwoju nowoczesnych rozwiązań wykorzystywanych w inżynierii biomedycznej.^{2,4}

W ramach niniejszego wystąpienia przedstawiono przegląd literatury dotyczącej funkcjonalnych poliolefin oraz możliwości ich wykorzystania jako nowoczesnych materiałów przeznaczonych do zastosowań w inżynierii biomedycznej. Omówiono wybrane kierunki badań związane z funkcjonalizacją poliolefin oraz wpływ tych modyfikacji na właściwości użytkowe materiałów. Szczególną uwagę poświęcono potencjałowi funkcjonalnych poliolefin w rozwoju nowoczesnych technologii medycznych.

Literatura:

1. Hossain, M.T.; Shahid, M.A.; Mahmud, N.; Habib, A.; Rana, M.M.; Khan, S.A.; Hossain, M.D. Research and application of polypropylene: a review. *Discover Nano* 2024, 19, 2. <https://doi.org/10.1186/s11671-023-03952-z>
2. Eldeeb, A.E.; Salah, S.; Elkasabgy, N.A. Biomaterials for Tissue Engineering Applications and Current Updates in the Field: A Comprehensive Review. *AAPS PharmSciTech* 2022, 23, 267. <https://doi.org/10.1208/s12249-022-02419-1>
3. Franssen, N.M.G.; Reek, J.N.H.; de Bruin, B. Synthesis of Functional 'Polyolefins': State of the Art and Remaining Challenges. *Chemical Society Reviews* 2013, 42, 5809–5832. <https://doi.org/10.1039/C3CS60032G>
4. Paxton, N.C.; Allenby, M.C.; Lewis, P.M.; Woodruff, M.A. Biomedical applications of polyethylene. *European Polymer Journal*, 2019, 118, 412–428. <https://doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2019.05.037>



S04 PS30

Mikrocząsteczki zbudowane z poli(alkoholu winylowego) załadowane *Mycobacterium bovis* BCG do zwalczania infekcji *Helicobacter pylori*

Brzeziński M^{1*}, Jaroniek P², Zatyka K², Gonciarz W², Chmiela M²

¹Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych, Polskiej Akademii Nauk,
ul. Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź;

²Katedra Immunologii i Biologii Zakaźnej, Instytut Mikrobiologii, Biotechnologii i Immunologii, Wydział
Biologii i Ochrony Środowiska, Uniwersytet Łódzki, ul. Banacha 12/16, 90-237 Łódź, Polska
e-mail marek.brzezinski@cbmm.lodz.pl

Rosnąca oporność na antybiotyki u patogenu żołądkowego *Helicobacter pylori* (*H. pylori*) sprawia, że standardowe terapie są coraz mniej skuteczne, co wymusza opracowanie nowych strategii terapeutycznych. Obiecującą alternatywą jest koncepcja odporności trenowanej (z ang. trained immunity), w której prątki *Mycobacterium bovis* BCG (*M. bovis* BCG) wykorzystuje się do niespecyficznego przeprogramowania komórek układu odporności wrodzonej, zwiększając w ten sposób zdolność gospodarza do zwalczania określonych patogenów bakteryjnych [1]. W tym celu zastosowano metodę suszenia rozpyłowego w celu wytworzenia mikrocząstek zdolnych do enkapsulacji żywych prątków i ich uwalniania w kwaśnym środowisku żołądka lub zasadowym środowisku jelit. Cząsteczki składają się z poli(alkoholu winylowego) (PVA) i pektyny, co zapewnia stabilność niezbędną do ochrony *M. bovis* BCG oraz ich kontrolowanego uwalniania w przewodzie pokarmowym. Zastosowana metoda pozwala na uzyskanie sferycznych cząstek o rozmiarach mikrometrycznych i gładkiej powierzchni, w zależności od konkretnego składu formułacji. Biozgodność i potencjał terapeutyczny układu oceniono na modelu *Cavia porcellus* (świnki morskiej) [2]. Po potwierdzeniu nietoksyczności nośnika przeprowadzono badania skuteczności po podaniu doustnym. Zmierzono w nich zdolność uwolnionych prątków *M. bovis* BCG do redukcji liczby bakterii *H. pylori* w żołądku i jelitach, co pozwoliło wykazać, że mikrokapsułkowanie utrzymuje aktywność immunogenną bakterii, zapewniając jednocześnie bezpieczną aplikację.

- [1] W. Gonciarz, A. Wosiak, A. Jeleń, E. Balcerzak, M. Brzeziński, K. Węgrzyn, O. Stasikowska-Kanicka, M. Chmiela, Modulation of the gastrointestinal immune environment by chitosan microparticles loaded with *Mycobacterium bovis* BCG in a *Cavia porcellus* model in vivo, leading to reduced experimental *H. pylori* gastric colonization, *Biomed. Pharmacother.* 196 (2026) 119126. <https://doi.org/10.1016/j.biopha.2026.119126>.
- [2] Mikrocząstki zawierające żywe prątki szczepionkowych *Mycobacterium bovis* BCG oraz sposób ichotrzymywania., Zgłoszenie patentowe P.454436

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach grantu SONATA 18 „Ocena zdolności prątków *Mycobacterium bovis* BCG-onko do kontrolowania rozwoju zakażenia *Helicobacter pylori*”, UMO-2022/47/D/NZ7/01097.



S04 PS31

Synteza i modyfikacja kopolimerów blokowych PAGE-PED-AGE w celu otrzymania funkcjonalnych nanocząstek

Bartłomiej Kost, Ewa Pajszczyk, Marta Socka, Marek Brzeziński

Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk,

Sienkiewicza 112, 90-363, Łódź, Polska

Bartlomiej.kost@cbmm.lodz.pl

Poli(glikol etylenowy) (PEG) jest jednym z najpowszechniej stosowanych polimerów w przemyśle biomedycznym, farmaceutycznym i kosmetycznym ze względu na biogodność i rozpuszczalność w wodzie [1]. Obecność jedynie dwóch grup hydroksylowych zlokalizowanych na końcach łańcucha polimeru znacznie ogranicza jego zastosowanie. Wprowadzenie grup funkcyjnych pozwalających na modyfikacje właściwości stanowi więc istotne wyzwanie. W tym celu zsyntetyzowano triblokowe kopolimery typu ABA, zawierające wewnętrzny blok B zbudowany z PEG oraz zewnętrzne bloki z poli(eteru allilowo-glicydylowego) (pAGE-PEG-pAGE). PEG o masie molowej $2000 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ zastosowano jako makroinicjator polimeryzacji eteru allilowo-glicydowego. Zmieniając stosunek monomeru do makroinicjatora, uzyskano serię kopolimerów o regulowanej długości bloku AGE. Następnie kopolimery funkcjonalizowano poprzez reakcje tiol-en typu „click” z użyciem kwasu tioglikolowego, tioglicerolu i kwasu merkaptobursztynowego. Z otrzymanych zmodyfikowanych kopolimerów, metodą nanowytrącania przygotowano nanocząstki o rozmiarach od 110 do 660 nm. Wyniki wykazały, że modyfikacja łańcucha głównego kopolimerów umożliwia kontrolę ich reaktywności oraz rozmiaru nanocząstek.



S04 PS32

Kompozyty polipropylenu z zawartością recyklowanych włókien szklanych

Rafał Oliwa, Katarzyna Bulanda, Mariusz Oleksy

¹Katedra Kompozytów Polimerowych, Wydział Chemiczny, Politechnika Rzeszowska im. Ignacego Łukasiewicza, Al. Powstańców Warszawy 6, 35-029 Rzeszów

*oliwa@prz.edu.pl

Znakomite właściwości użytkowe kompozytów polimerowo-szklanych, takie jak wysoka wytrzymałość właściwa i odporność na degradację środowiskową, przyczyniły się do ich masowego wykorzystania w przemyśle na przestrzeni ostatnich dekad. Zdolność tych materiałów do wieloletniej, bezawaryjnej pracy stanowi obecnie jedno z największych wyzwań środowiskowych. Ponieważ pierwsze generacje masowo produkowanych elementów kompozytowych osiągają właśnie kres swojej użyteczności i są wycofywane z eksploatacji, przemysł musi zmierzyć się z nagłym napływem ogromnych ilości trudnych w utylizacji odpadów. Zjawisko to potęgowane jest przez dyrektywy Unii Europejskiej, takie jak Dyrektywa 2018/850 [1], która radykalnie ogranicza możliwość deponowania odpadów komunalnych i przemysłowych na wysypiskach (do zaledwie 10% do 2035 roku), wymuszając poszukiwanie alternatywnych metod ich zagospodarowania w oparciu o model Gospodarki o Obiegu Zamkniętym (GOZ). Największym źródłem szacowanych odpadów z tworzyw sztucznych wzmacnianych włóknem jest sektor budowlany i konstrukcyjny, odpowiedzialny za niemal 200 tysięcy ton śmieci w 2025 roku [2,3]. Biorąc pod uwagę technologiczne i prawne ograniczenia takich metod jak składowanie czy bezpośrednie spalanie, absolutnym priorytetem we współczesnej inżynierii materiałowej staje się włączenie odpadów kompozytowych w ramy Gospodarki o Obiegu Zamkniętym (GOZ). W pełni zrównoważonym podejściem do zarządzania odpadami polimerowymi jest transformacja ich w pełnoprawne surowce wtórne, które mogą posłużyć do wytwarzania materiałów kompozytowych nowej generacji [4].

Celem niniejszej pracy było przeprowadzenie procesu odzysku i regeneracji włókien szklanych z odpadów kompozytowych na podstawie żywic chemoutwardzalnych oraz zbadanie ich wpływu na właściwości nowo wytworzonych materiałów. Określono skuteczność wieloetapowej procedury recyklingu, obejmującej w pierwszej kolejności fizyczny odzysk napelnacza (mechaniczne rozdrobnienie i separację frakcji włóknistej i ziarnistej), a następnie jego obróbkę termiczną tkenową i beztlenową, oraz regenerację chemiczną (trawienie zasadowe i silanizację). W końcowym etapie określono wpływ tak przygotowanych włókien na właściwości mechaniczne kompozytów na osnowie polipropylenowej.

Badania dofinansowano ze środków Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach Programu „Regionalna Inicjatywa Doskonałości”, nr umowy RID/SP/0032/2024/01.

[1] Dyrektywa Parlamentu Europejskiego i Rady (UE) 2018/850 z Dnia 30 Maja 2018 r. Zmieniająca Dyrektywę 1999/31/WE w Sprawie Składowania Odpadów; 2018; p. 100.

[2] Qureshi J.: A Review of Recycling Methods for Fibre Reinforced Polymer Composites. *Sustainability* 2022, 14, 16855, doi:10.3390/su142416855.

[3] Gonçalves R.M., Martinho A., Oliveira J.P.: Recycling of Reinforced Glass Fibers Waste: Current Status. *Materials* 2022, 15, 1596, doi:10.3390/ma15041596.

[4] Nuruzzaman Md., Shathi A.S., Yousuf A., Islam Md.J., Rana Md.S. et. al.: Composite Materials from Waste Plastics: A Sustainable Approach for Waste Management and Resource Utilization. *Polymers and Polymer Composites* 2025, 33, 09673911251318542, doi:10.1177/09673911251318542.

Innowacyjne kleje typu hot-melt na bazie funkcjonalizowanych poliolefin: Ewaluacja właściwości, efekt rozcieńczeń i modelowanie adhezji

Michalina Razik¹, Weronika Nowicka^{1,2}, Wojciech Szot^{1,2}, Rob Duchateau^{2,3}, Lidia Jasińska-Walc^{1,2}

¹Laboratorium Makromolekularnych Materiałów Stosowanych, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk, Polska

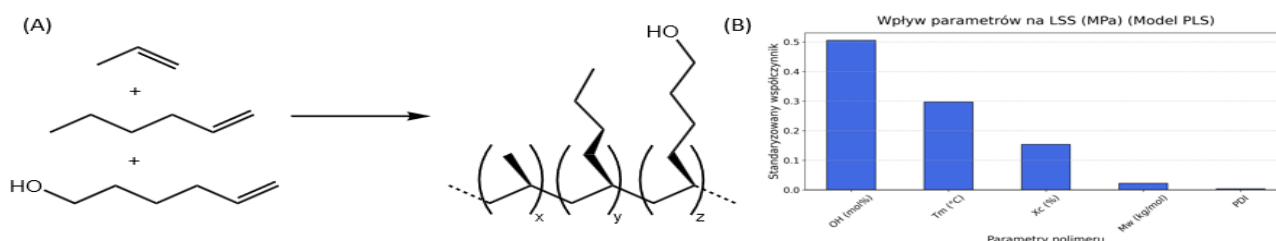
²SABIC Technology & Innovation, STC Geleen, Urmonderbaan 22, 6160 RD Geleen, Holandia

³Department of Chemical Engineering, University of Groningen, Nijenborgh 4, 9747 AG Groningen, Holandia
s193254@student.pg.edu.pl

Poliolefiny, dzięki wyjątkowej odporności chemicznej, łatwej przetwarzalności i niskiej cenie, stanowią blisko 60% z ponad 400 mln ton globalnie produkowanych tworzyw sztucznych [1]. Wprowadzenie do ich struktury polarnych grup, tworząc funkcjonalizowane poliolefiny (FPO), pozwala połączyć zalety węglowodorowej matrycy odpornej na czynniki chemiczne z nowymi, pożądanymi cechami, takimi jak drastycznie ulepszona adhezja [2]. Materiały te syntezuje się na dwa główne sposoby: poprzez bezpośrednią kopolimeryzację α -olefin z monomerami funkcjonalnymi lub w procesach postpolimeryzacyjnych (m.in. szczepienie). Te drugie dominują w przemyśle ze względu na niższe koszty i brak ryzyka dezaktywacji katalizatorów przez polarne atomy [3]. Funkcjonalizowane poliolefiny stanowią odpowiedź na rosnące zapotrzebowanie rynku na ekologiczne, bezrozsączalnikowe kleje termotopliwe (Hot Melt Adhesives, HMA), będące alternatywą dla trudnych w recyklingu układów poliuretanowych oraz kopolimerów etylenu i octanu winylu (EVA), zgodną z ideą gospodarki cyrkularnej [4].

Niniejsza praca prezentuje odkrycia dotyczące wykorzystania FPO jako HMA z naciskiem na terpolimery oparte na propylenie, 1-heksenie i 5-heksen-1-olu, poly(C3-co-C6-co-C6OH) (Rys.1.A) [5]. W badaniach wykazano między innymi, tak zwany efekt rozcieńczeń – gdzie zaledwie ułamek procenta ($\leq 0,5$ mol%) grup hydroksylowych wystarcza do osiągnięcia wysokiej siły adhezji przekraczającej 16 MPa. Co więcej, parametry te zostają zachowane nawet po stukrotnym rozcieńczeniu FPO znacznie tańszą, niefunkcjonalizowaną poliolefiną stanowiącą matrycę polimerową. Na tle klasycznych promotorów adhezji, takich jak reaktywny terpolimer etylenu (RET), który w połączeniu z HDPE daje optymalne właściwości klejące przy stężeniu 25-33% [6], badane materiały wyróżniają się bardzo wysoką adhezją już przy kilku procentach FPO.

Rys.1. (A) Schemat katalitycznej syntezy badanego terpolimeru poly(C3-co-C6-co-C6OH); (B) Znormalizowane



współczynniki modelu PLS obrazujące dominujący wpływ zawartości grup -OH na siłę adhezji (LSS)

W celu dogłębnego zrozumienia czynników regulujących właściwości mechaniczne i adhezyjne funkcjonalizowanych poliolefin, w niniejszej pracy zastosowano innowacyjne połączenie chemii materiałowej z metodami chemometrycznymi i uczeniem maszynowym (Data Science) (Rys.1.B). Analiza danych pozwala na błyskawiczne zidentyfikowanie ukrytych wzorców i kluczowych parametrów napędzających adhezję, otwierając drogę do predykcyjnego projektowania nowych materiałów. Analiza pokazuje, że jej powtórne wykonanie na podstawie większej ilości danych może pozwolić na wyznaczenie modelu pozwalającego na predykcję właściwości adhezyjnych materiałów poliolefinowych przyczyniając się jednocześnie do znacznego skrócenia czasu badań, redukcji kosztów eksperymentalnych oraz przyspieszenia komercjalizacji nowoczesnych klejów HMA przyjaznych środowisku.

[1] Raport World Plastic Production, <https://plasticseurope.org/pl>.

[2] M. Białek et al., *Wiad. Chem.* 2024, 78, 5.

[3] C. Tan et al., *Angew. Chem.* 2025, 137, e202424529.

[4] E. G. Fernandes et al., *J. Appl. Polym. Sci.* 2001, 80, 2889.

[5] J. Kruszynski et al., *Macromolecules* 2025, 58, 2894.

[6] C. T. Love et al., *J. Appl. Polym. Sci.* 2007, 104, 331



S04 PS34

Charakterystyka nowych faz w układzie fazowym Ag-Pd-F

Kacper Jakubowski¹, Katarzyna Kuder¹, Alina Climova¹, Przemysław J. Malinowski,¹ Zoran Mazej², Wojciech Grochala¹

¹Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski, Banacha 2C, 02-097, Warszawa

²Instytut „Jožef Stefan”, Zakład Chemii Nieorganicznej i Technologii, Jamova cesta 39, 1000 Lublana

adres korespondencyjny:

k.jakubowski@cent.uw.edu.pl

Układy oparte na srebrze dwuwartościowym Ag^{2+} (o konfiguracji elektronowej d^9) stanowią jedno z intrygujących pól badawczych we współczesnej chemii i fizyce ciała stałego [1]. Głównym źródłem zainteresowania związkami chemicznymi tego kationu są uderzające analogie między ich strukturą krystaliczną, elektronową oraz właściwościami magnetycznymi do tych obserwowanych dla tlenkowych związków miedzi Cu^{2+} , stanowiących fundament wysokotemperaturowych nadprzewodników miedziowych [2]. Otwarta powłoka 4d jonu Ag^{2+} indukuje silny efekt Jahn-Tellera oraz generuje wyjątkowo silne, niskowymiarowe sprzężenia antyferromagnetyczne poprzez wysoce kowalencyjne wiązania metal-ligand [3]. Badania nad tymi układami są jednak wymagające technicznie ze względu na ekstremalny potencjał redoks pary $\text{Ag}^{2+}/\text{Ag}^+ = \text{ca. } 2 \text{ V vs. NHE}$, co czyni srebro(II) jednym z najsilniejszych znanych utleniaczy i ogranicza jego występowanie do najbardziej odpornych na utlenianie środowisk chemicznych [4]. Liczba znanych związków chemicznych Ag^{2+} z innymi kationami, szczególnie metali przejściowych, jest przez to bardzo ograniczona.

Niniejsza praca usiłuje poszerzyć wiedzę dotyczącą chemii związków srebra(II) poprzez eksplorację układu fazowego Ag-Pd-F. Przeprowadzone badania doprowadziły do opracowania kilku nowych ścieżek syntezy związków zawierających jednocześnie srebro, pallad i fluor, co umożliwiło identyfikację nieznaną dotąd faz krystalicznych. W wystąpieniu omówione zostaną propozycje struktury krystalicznej, widma oscylacyjne, oraz właściwości magnetyczne i elektronowe otrzymanych materiałów.

1. Grochala, W., & Mazej, Z. (2015). Chemistry of Silver(II): A Cornucopia of Peculiarities. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 373, 20140179.
2. Grochala, W. (2018). Silverland: the Realm of Compounds of Divalent Silver—and Why They are Interesting. *J Supercond Nov Magn* **31**, 737–752
3. Mazej, Z., Kurzydłowski, D., & Grochala, W. (2016). Unique Silver(II) Fluorides: The Emerging Electronic and Magnetic Materials. In A. Tressaud & K. R. Poeppelmeier (Eds.), *Photonic and Electronic Properties of Fluoride Materials* (pp. 319–341). Elsevier.
4. Leszczyński, P. J., & Grochala, W. (2013). Strong Cationic Oxidizers: Thermal Decomposition, Electronic Structure and Magnetism of Their Compounds. *Acta Chimica Slovenica*, 60, 455–470.

Modyfikacja właściwości polipropylenu za pomocą elastomerowych kopolimerów poliolefinowych: wpływ oddziaływań międzyfazowych na właściwości użytkowe materiału

Dominika Iwanicka¹, Weronika Nowicka^{1,2}, Wojciech Szot^{1,2}, Rob Duchateau^{2,3}, Lidia Jasińska-Walc^{1,2}

¹Laboratorium Makromolekularnych Materiałów Stosowanych, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska
ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk, Polska

²SABIC Technology & Innovation, STC Geleen, Urmonderbaan 22, 6167 RD Geleen, Holandia

³Chemical Product Engineering, Department of Chemical Engineering, University of Groningen, Nijenborgh
4, 9747 AG Groningen, Holandia
e-mail: s189094@student.pg.edu.pl

Polipropylen (PP) należy do najczęściej stosowanych polimerów termoplastycznych, jednak jego właściwości użytkowe często wymagają modyfikacji w celu dostosowania materiału do określonych zastosowań przetwórczych i aplikacyjnych. Pomimo korzystnych właściwości, takich jak niska gęstość, odporność chemiczna oraz łatwość przetworstwa, PP może wykazywać ograniczoną elastyczność oraz niewystarczającą odporność na pękanie w warunkach wymagających większej zdolności do odkształceń. Z tego względu istotne jest poszukiwanie metod modyfikacji, które pozwalają poprawić właściwości użytkowe materiału bez utraty jego podstawowych zalet przetwórczych. Szczególnie interesującym rozwiązaniem jest zastosowanie elastomerowych kopolimerów poliolefinowych, które ze względu na podobieństwo chemiczne do matrycy PP mogą korzystnie wpływać na kompatybilność składników, morfologię mieszaniny oraz oddziaływania międzyfazowe. Jednym ze sposobów regulowania właściwości polipropylenu jest wprowadzenie do matrycy elastomerowych kopolimerów poliolefinowych, które mogą wpływać na elastyczność, właściwości mechaniczne, morfologię, strukturę krystaliczną oraz zachowanie materiału podczas przetwarzania.¹⁻³

Celem niniejszego wystąpienia jest prezentacja otrzymanych mieszanin PP z wybranymi elastomerowymi kopolimerami poliolefinowymi oraz ich charakterystyka pod względem wpływu rodzaju modyfikatora na właściwości użytkowe i przetwórcze PP. Charakterystyka próbek obejmuje analizę właściwości termicznych metodą różnicowej kalorymetrii skaningowej, badania dynamiczno-mechaniczne, próbę rozciągania oraz ocenę struktury z wykorzystaniem szerokokątowej dyfrakcji rentgenowskiej. Dodatkowo, w trakcie prezentacji przedstawiony zostanie wpływ dodatku modyfikatora na transparentność próbek.¹⁻³

Przeprowadzone badania pozwolą określić wpływ rodzaju oraz ilości elastomerowego dodatku na właściwości termiczne, mechaniczne i strukturalne mieszanin PP, a także wskazać zakres składu umożliwiający otrzymanie materiałów o korzystnych właściwościach użytkowych. Opracowanie takich kompozycji może stanowić praktyczne podejście do modyfikacji polipropylenu z wykorzystaniem kompatybilnych kopolimerów poliolefinowych, wpisując się w aktualne kierunki badań nad regulowaniem właściwości materiałów poliolefinowych poprzez mieszanie odpowiednio dobranych komponentów elastomerowych.¹⁻⁴



Rys.1. Uproszczony schemat procesu otrzymywania i charakterystyki mieszanin polipropylenu PP 527K z dodatkiem modyfikatorów i stabilizatora.

Literatura:

1. Mohd Yasin, S. B.; Terry, J. S.; Taylor, A. C. Fracture and Mechanical Properties of an Impact Toughened Polypropylene Composite: Modification for Automotive Dashboard-Airbag Application. *RSC Advances* 2023, 13, 27461–27475. DOI: 10.1039/D3RA04151D.
2. Li, R.; Wang, N.; Bai, Z.; Chen, S.; Guo, J.; Chen, X. Microstructure Design of Polypropylene/Expandable Graphite Flame Retardant Composites Toughened by the Polyolefin Elastomer for Enhancing Its Mechanical Properties. *RSC Advances* 2021, 11, 6022–6030. DOI: 10.1039/D0RA09978C.
3. Li, C.; Hu, J.; Yan, H.; Yao, Y.; Zhang, L.; Bao, J. Preparation of Open-Cell Long-Chain Branched Polypropylene/Polyolefin Elastomer Blend Foams for Oil Absorption. *ACS Omega* 2023, 8, 49372–49382. DOI: 10.1021/acsomega.3c07915.
4. Kruszynski, J.; Nowicka, W.; Pasha, F. A.; Yang, L.; Rozanski, A.; Bouyahy, M.; Kleppinger, R.; Jasińska-Walc, L.; Duchateau, R. Tuning the Adhesive Strength of Functionalized Polyolefin-Based Hot Melt Adhesives: Unexpected Results Leading to New Opportunities. *Macromolecules* 2025, 58, 2894–2904. DOI: 10.1021/acs.macromol.4c02945.



S04 PS36

Elektroaktywne pochodne karbazolowo-tiofenowe jako monomery do otrzymywania funkcjonalnych warstw polimerowych o modulowanych właściwościach optoelektronicznych

Magdalena Ciuchta,^a Roman Gańczarczyk,^{a,b} Krzysztof Noworyta,^c Renata Rybakiewicz-Sekita^a

^a Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Matematyczno-Przyrodniczy. Szkoła Nauk Ścisłych, Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego, ul. K. Wóycickiego 1/3, 01-938 Warszawa

^b Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska
ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa

^c Instytut Chemii Fizycznej PAN,
ul. Kasprzaka 44/52 01-224 Warszawa
r.rybakiewicz@uksw.edu.pl

Projektowanie organicznych układów π -sprzężonych o kontrolowanych właściwościach optoelektronicznych stanowi istotny kierunek badań w chemii materiałów funkcjonalnych. Szczególne znaczenie mają pochodne zawierające jednostki donorowe i akceptorowe, ponieważ odpowiedni dobór fragmentów molekularnych umożliwia modulację struktury elektronowej, właściwości redoks oraz zdolności do tworzenia elektroaktywnych warstw polimerowych.

W pracy otrzymano serię pochodnych karbazolu zawierających jednostki tiofenowe oraz zróżnicowane podstawniki aromatyczne. Struktury związków potwierdzono z wykorzystaniem metod spektroskopowych, w tym spektroskopii NMR oraz FTIR. Przeprowadzono również badania właściwości optycznych metodą spektroskopii UV-Vis, które wykazały wpływ charakteru podstawników na położenie i intensywność pasm absorpcyjnych.

Właściwości elektrochemiczne otrzymanych związków badano metodą woltamperometrii cyklicznej w wybranych układach rozpuszczalnik-elektrolit. Na podstawie uzyskanych danych wyznaczono podstawowe parametry redoks oraz oszacowano wielkości opisujące strukturę elektronową badanych układów, w tym potencjał jonizacji, powinowactwo elektronowe i elektrochemiczną przerwę energetyczną. Wyniki wskazują, że modyfikacja struktury podstawników pozwala skutecznie wpływać na właściwości elektrochemiczne oraz charakter przejść elektronowych. Szczególnie wyraźny wpływ obserwowano w układach zawierających silnie donorowe lub akceptorowe fragmenty, co może świadczyć o udziale procesów wewnątrzcząsteczkowego przeniesienia ładunku.

Dla otrzymanych monomerów przeprowadzono również próby elektropolimeryzacji, prowadzące do wytworzenia cienkich warstw polimerowych na powierzchni elektrody. Otrzymane filmy wykazywały elektroaktywność oraz stabilność podczas cyklicznych zmian potencjału. W wybranych przypadkach zaobserwowano zmiany barwy warstw związane z procesami utleniania i redukcji, wskazujące na ich potencjalne właściwości elektrochromowe.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że racjonalna modyfikacja struktury układów karbazolowo-tiofenowych jest skutecznym narzędziem do regulowania ich właściwości optycznych, elektrochemicznych i warstwowotwórczych. Badane związki oraz otrzymane z nich warstwy polimerowe mogą stanowić obiecującą platformę do dalszego rozwoju materiałów funkcjonalnych dla elektroniki i fotoniki organicznej, w tym urządzeń elektrochromowych oraz sensorów chemicznych.

Podziękowania: Niniejsze badania były finansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach grantu OPUS 25, nr 2023/49/B/NZ7/02718.



S04 PS37

Właściwości rdzeni poliuretanowych płyt warstwowych na bazie biopoliolu z wybranego oleju roślinnego

Marek Isbrandt, Marcin Borowicz, Aleksandra Piotrowska, Joanna Paciorek-Sadowska
Uniwersytet Kazimierza Wielkiego w Bydgoszczy, Wydział Inżynierii Materiałowej, Katedra Chemii i Technologii Poliuretanów
ul. J. K. Chodkiewicza 30, 85-064 Bydgoszcz
m.isbrandt@ukw.edu.pl

Zrównoważonym rozwojem nazywa się doktrynę ekonomiczną zakładającą odpowiednie relacje pomiędzy gospodarką, dbałością o środowisko i jakością życia. Podstawową zasadą jest osiągnięcie takiego stanu, aby wszystkie potrzeby ludzi zostały zaspokojone przy jednoczesnym zachowaniu integralności ekosystemu Ziemi. W przypadku tworzyw poliuretanowych dotyczy to przede wszystkim dwóch zakresów. Pierwszym z nich jest zastąpienie składników pochodzących ze źródeł nieodnawialnych ich odnawialnymi odpowiednikami. Ma to przede wszystkim na celu ograniczenie wydobywania i przerobu surowców kopalnych oraz zmniejszenia wywołanej tym procesem degradacji środowiska naturalnego. Z kolei drugi odnosi się do ograniczenia emisji niedegradowalnych odpadów do środowiska, poprzez wprowadzenie do receptury tworzywa składników sprzyjających biodegradacji. Zapobiega to przede wszystkim zaleganiu odpadów użytkowych na wysypiskach lub ich termicznej utylizacji, której towarzyszy emisja toksycznych dla środowiska gazów takich jak np. cyjanowodór. Do najpopularniejszych metod implementacji zasady zrównoważonego rozwoju w przemyśle materiałów poliuretanowych należy stosowanie komponentów na bazie surowców pochodzenia naturalnego (np. biopoliol, czy bionapelniacze).

W ramach prowadzonych badań otrzymano pianki poliizocyjanurowe (PIR) na bazie wybranego „egzotycznego” oleju roślinnego dedykowane do zastosowania jako rdzenie płyt warstwowych. Serię pianek poliizocyjanurowych otrzymano na bazie biopoliolu z wbudowanymi heteroatomami siarki (w wyniku reakcji oleju roślinnego z tiodietanolem). Syntezę sztywnych pianek poliizocyjanurowych prowadzono metodą jednostopniową w układzie dwukomponentowym, gdzie jednym komponentem była przedmieszka polioliowa zawierająca surowce polioliowe (poliol petrochemiczny i biopoliol) oraz dodatki (katalizatory, środek powierzchniowo-czynny, porofor, środek zmniejszający palność), natomiast drugim komponentem był polimeryczny 4,4'-diizocyjaninan difenylometylenu (PMDI). Otrzymywanie nowych sztywnych pianek PIR prowadzono poprzez częściowe zastępowanie polioli petrochemicznego (Rokopol RF-551) w formulacji poliuretanowej, biopoliolem na bazie „egzotycznego” oleju roślinnego (co 25% masowych).

Otrzymane nowe sztywne pianki PIR dedykowane do zastosowania jako rdzeń płyty warstwowej zostały poddane podstawowym badaniom fizykomechanicznym (gęstość pozorną, wytrzymałość na ściskanie, kruchość), starzeniowym (zmiana wymiarów liniowych objętości geometrycznej, ubytek masy), termoizolacyjnym (współczynnik przewodzenia ciepła „λ”). Na podstawie badań stwierdzono, że modyfikacja pianek biopoliolem na bazie wybranego „egzotycznego” oleju roślinnego istotnie wpłynęła na właściwości użytkowe otrzymywanych materiałów.

Zastosowanie biopoliolu na bazie „egzotycznego” oleju roślinnego do syntezy materiałów poliuretanowych doskonale wpisuje się w doktrynę zrównoważonego rozwoju oraz zasady Zielonej Chemii. Pozwala na częściowe zastąpienie polioli petrochemicznych, co skutkuje ograniczeniem ich stosowania.



S04 PS38

Hybrydowe uniepalniacze na bazie modyfikowanych glinokrzemianów warstwowych do tworzyw sztucznych – synteza i charakterystyka

Beata Podkościelna¹, Andrzej Puszka¹, Bogdan Tarasiuk¹, Kamil Dziuba²

Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Wydział Chemii, Instytut Nauk Chemicznych,

¹Katedra Chemii Polimerów; ²Katedra Chemii Organicznej i Krystalochemii

Pl. M. Curie-Skłodowskiej 5 20-031 Lublin;

e-mail: beata.podkoscielna@umcs.pl

Rosnące wymagania dotyczące bezpieczeństwa pożarowego tworzyw sztucznych oraz ograniczania negatywnego wpływu materiałów na środowisko stwarzają potrzebę opracowania nowoczesnych, bezhalogenowych środków uniepalniających. Szczególne zainteresowanie wzbudzają hybrydowe uniepalniacze, których skuteczność wynika z synergicznego oddziaływania składników nieorganicznych i naturalnych związków organicznych. Modyfikowane glinokrzemiany warstwowe stanowią obiecującą grupę materiałów do zastosowań jako napełniacze funkcjonalne i uniepalniacze, ponieważ poprawiają stabilność termiczną materiałów oraz ograniczają transport ciepła i lotnych produktów rozkładu. Dodatkowa modyfikacja ich powierzchni związkami fosforowymi oraz biopolimerami, takimi jak chitozan i lignina, umożliwia uzyskanie hybrydowych układów o zwiększonej skuteczności przeciwpalnej, wynikającej z intensyfikacji procesów tworzenia ochronnej warstwy zwęglonej.

Celem badań było opracowanie metody syntezy oraz kompleksowa charakterystyka hybrydowych uniepalniaczy opartych na modyfikowanych glinokrzemianach warstwowych przeznaczonych do stosowania jako ekologiczne dodatki do tworzyw sztucznych. Naturalne glinokrzemiany, obejmujące glinokrzemiany warstwowe (montmorylonit, bentonit, kaolinit i talk) oraz zeolit klinoptylolit, stanowią obiecującą grupę materiałów do zastosowań jako funkcjonalne dodatki uniepalniające dzięki wysokiej stabilności termicznej oraz zdolności do ograniczania transportu ciepła i lotnych produktów rozkładu.

W wyniku badań zsyntetyzowano hybrydowe uniepalniacze poprzez modyfikację naturalnych glinokrzemianów warstwowych kwasami fosforowymi w obecności chitozanu i ligniny. Otrzymane materiały poddano procesom homogenizacji, wygrzewania i suszenia, uzyskując proszkowe dodatki o zróżnicowanym składzie. Strukturę chemiczną i morfologię otrzymanych uniepalniaczy scharakteryzowano z wykorzystaniem metod spektroskopowych i mikroskopowych, natomiast ich właściwości termiczne oceniono metodą analizy termogravimetrycznej. Zbadano wpływ rodzaju glinokrzemianu oraz zastosowanych modyfikatorów na budowę i stabilność termiczną otrzymanych materiałów. Przeprowadzono również ocenę potencjału aplikacyjnego otrzymanych uniepalniaczy jako dodatków do tworzyw sztucznych.

Podziękowanie:

Badania zostały zrealizowane w ramach projektu „Inkubator Rozwoju”, Science4Business – Nauka dla biznesu, współfinansowanego ze środków Unii Europejskiej w ramach programu Fundusze Europejskie dla Nowoczesnej Gospodarki 2021–2027, Działanie 2.5.



S04 PS39

Od algorytmów ewolucyjnych do nowych magnesów kwantowych opartych na związkach srebra(II)

Katarzyna Kuder, Wojciech Grochala

Centrum Nowych Technologii UW
ul. S. Banacha 2c, 02-097 Warszawa
k.kuder@cent.uw.edu.pl

Współcześnie, materiały magnetyczne stanowią ważny obszar fizyki oraz chemii ze względu na ich szerokie zastosowania m.in. w spintronice, zapisie danych i technologiach kwantowych^[1, 2]. Właściwości materiałów magnetycznych wynikają ze złożonej zależności między strukturą krystaliczną, konfiguracją elektronową oraz oddziaływaniami wymiennymi i nadwymiennymi, co powoduje, że ich projektowanie staje się dużym wyzwaniem. Z tego powodu metody obliczeniowe, a szczególnie algorytmy ewolucyjne, odgrywają kluczową rolę w przewidywaniu i wstępnej selekcji nowych związków przed ich syntezą w laboratorium^[3, 4].

Szczególnie interesującą grupę stanowią związki zawierające kationy Ag(II), gdzie srebro(II) ma konfigurację elektronową d^9 , analogiczną do Cu(II). W związku z tym, fluorki Ag(II) są analogami tlenków Cu(II) i mogą wykazywać bardzo silne oddziaływania nadwymienne, porównywalne lub większe niż w tlenkach miedzi(II)^[5]. Jest to szczególnie ważne, gdyż dla kupratów oddziaływania magnetyczne są ściśle związane z właściwościami nadprzewodzącymi dwuwymiarowych układów domieszkowanych^[6].

W niniejszej pracy zbadano nieopisane dotąd układy Be–Ag(II)–F oraz Li–Ag(II)–F z wykorzystaniem algorytmów ewolucyjnych i obliczeń z użyciem teorii funkcjonału gęstości^[3]. Dla AgBeF_4 wyznaczono pięć najniższych energetycznych odmian polimorficznych, a w układzie Li–Ag(II)–F zbadano fazy LiAgF_3 i Li_2AgF_4 . Uzyskane struktury są metastabilne względem odpowiednich fluorków binarnych, jednak obliczenia entalpii reakcji wskazują na możliwość ich otrzymania alternatywnymi drogami syntezy, m.in. z udziałem F_2 lub rodników F. Wszystkie fazy wykazują antyferromagnetyczny stan podstawowy, przy czym najsilniejsze oddziaływania nadwymienne obserwuje się dla AgBeF_4_4 , AgBeF_4_5 i LiAgF_3_2 , gdzie J osiąga odpowiednio około –460, –368 i –380 meV. Tak duże wartości, przewyższające wszystkie znane dotychczas, wynikają z obecności dimerów $[\text{Ag}_2\text{F}_7]$ oraz pokrewnych łańcuchów $[\text{AgF}_3]$. Wyniki te pokazują, że fluorki Ag(II) są obiecującymi kandydatami na nowe silnie sprzężone magnesy kwantowe^[7, 8].

- [1] H. Li, S. Ruan and Y.-J. Zeng, *Adv. Mater.*, 2019, **31**, 1900065.
- [2] R. L. Comstock, *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, 2002, **13**, 509–523.
- [3] S. Hajinazar and E. Zurek, *Comput. Phys. Commun.*, 2024, **304**, 109306.
- [4] S. Rahmanian Koshkaki, et al., *J. Chem. Phys.*, 2022, **157**, 124704.
- [5] D. Kurzydłowski and W. Grochala, *Angew. Chem.*, 2017, **129**, 10248–10251.
- [6] O. Stockert, et al., *Nat. Phys.*, 2011, **7**, 119–124.
- [7] K. Kuder and W. Grochala, arXiv, 2025, arXiv:2512.05048.
- [8] K. Kuder and W. Grochala, in preparation 2026.



S04 PS40

Właściwości emisyjne chlorowodorków hydrazonów hydrałazyny w fazie stałej

Igor Mossur, Agata Trzęsowska-Kruszyńska, Marcin Świątkowski, Tomasz Sierański

*Zespół Chemii Analitycznej i Strukturalnej, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Wydział Chemiczny
Politechniki Łódzkiej, ul. Żeromskiego 114, 90-543 Łódź*

256169@edu.p.lodz.pl

Związki organiczne wykazujące emisję w ciele stałym stanowią interesującą grupę materiałów molekularnych ze względu na ich potencjalne zastosowanie w optoelektronice, czujnikach optycznych i materiałach zabezpieczających [1-3]. Szczególną uwagę zwraca się na układy, których właściwości emisyjne można modulować poprzez modyfikacje strukturalne, oddziaływania międzycząsteczkowe i zmiany stanu protonowania. Hydrazony hydrałazyny są w tym kontekście interesującą grupą związków, ponieważ łączą obecność ugrupowania hydrazonowego, skoniugowanego układu elektronów π oraz miejsc zdolnych do protonowania i tworzenia oddziaływań międzycząsteczkowych, w tym wiązań wodorowych.

Celem badań było określenie wpływu struktury molekularnej, natury podstawników oraz upakowania krystalicznego na fluorescencję w ciele stałym serii chlorowodorków hydrazonów hydrałazyny. W tym celu zsyntetyzowano związki zawierające różne fragmenty aldehydowe, w tym zarówno aldehydy aromatyczne, jak i pochodne aldehydu cynamonowego o rozbudowanym układzie sprzężonym. Porównanie uzyskanych struktur umożliwiło analizę zależności między efektami elektronowymi, obecnością potencjalnych donorów i akceptorów wiązań wodorowych, stopniem sprzężenia oraz organizacją cząsteczek w ciele stałym.

Wykazano, że wolne zasady hydrazonowe w badanej serii wykazują bardzo słabą emisję lub jej brak, podczas gdy odpowiadające im chlorowodorki wykazują fluorescencję w ciele stałym. Obserwacja ta wskazuje, że protonowanie może odgrywać ważną rolę w indukowaniu właściwości emisyjnych w tej grupie związków. Stwierdzono również, że maksimum emisji i intensywność fluorescencji zależą nie tylko od struktury molekularnej, ale także od upakowania krystalicznego i rodzaju oddziaływań międzycząsteczkowych obecnych w sieci krystalicznej.

Uzyskane wyniki wskazują, że chlorowodorki hydrazonów hydrałazyny mogą służyć jako użyteczny model do badania relacji między protonowaniem, strukturą molekularną, upakowaniem krystalicznym i emisją w ciele stałym. Podejście to może wesprzeć projektowanie nowych organicznych materiałów fluorescencyjnych o właściwościach modulowanych przez zmiany strukturalne i oddziaływania w ciele stałym.

Literatura

- [1] M. K. Bera, P. Pal, S. Malik, J. Mater. Chem. C, 8 (2020) 788.
- [2] N. Akshaya, A. Thomas, G. J. Martis, S. L. Gaonkar, Discov. Appl. Sci., 7 (2025) 110.
- [3] Y. Li, P. Gao, Chemosensors, 11 (2023) 489.



S04 PS41

Jadalne powłoki chitozanowe z dodatkiem oleju z pestek pomidora, jako metoda ograniczania zmian jakościowych borówki amerykańskiej podczas przechowywania

Sylwia Grabska-Zielińska¹, Ewa Olewnik-Kruszkowska²

¹Zakład Technologii Chemicznej i Fizykochemii Materiałów, Wydział Technologii I Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska im. J.J. Śniadeckich

²Katedra Chemii Fizycznej i Fizykochemii Polimerów, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
sylwia.grabska-zielinska@pbs.edu.pl

Borówka amerykańska (*Vaccinium corymbosum* L.) jest owocem cenionym ze względu na wysoką wartość odżywczą i zawartość związków bioaktywnych. Jednocześnie, z uwagi na wysoką zawartość wody i intensywne procesy metaboliczne zachodzące po zbiorze, owoce te są podatne na zmiany jakościowe podczas przechowywania. Jedną z metod przedłużania trwałości świeżych owoców jest stosowanie jadalnych powłok na bazie biopolimerów, które mogą ograniczać utratę wody oraz spowalniać procesy degradacyjne.

Celem pracy było opracowanie i charakterystyka jadalnych powłok na bazie chitozanu z dodatkiem oleju z pestek pomidora oraz ocena ich wpływu na wybrane właściwości jakościowe borówki amerykańskiej podczas przechowywania chłodniczego. Powłoki przygotowano z 2% roztworu chitozanu w 0,1 M kwasie octowym z dodatkiem gliceryny jako plastyfikatora oraz mieszaniny oleju z pestek pomidora i Tween 80 (1:1) w różnych stężeniach. Otrzymane układy wykorzystano do wytworzenia filmów oraz emulsji przeznaczonych do powlekania owoców.

W ramach charakterystyki filmów przeprowadzono badania przepuszczalności pary wodnej, analizę FTIR, obserwacje morfologii powierzchni metodami SEM i AFM, a także ocenę przezroczystości i właściwości barierowych względem promieniowania UV. Stwierdzono, że dodatek oleju z pestek pomidora wpływał na właściwości optyczne otrzymanych materiałów, powodując zmiany ich przezroczystości oraz barwy. Borówki amerykańskie pokryte opracowanymi emulsjami przechowywano przez 7 dni w warunkach chłodniczych. W trakcie przechowywania oceniano zmiany masy owoców związane z utratą wody oraz ich właściwości mechaniczne metodą ściskania.

Uzyskane wyniki wskazują, że zastosowanie jadalnych powłok chitozanowych z dodatkiem oleju z pestek pomidora może ograniczać niekorzystne zmiany jakościowe borówki amerykańskiej podczas przechowywania oraz sprzyjać zachowaniu jej właściwości mechanicznych. Opracowane powłoki stanowią obiecujące rozwiązanie w zakresie wykorzystania naturalnych i biodegradowalnych materiałów do przedłużania trwałości owoców miękkich.

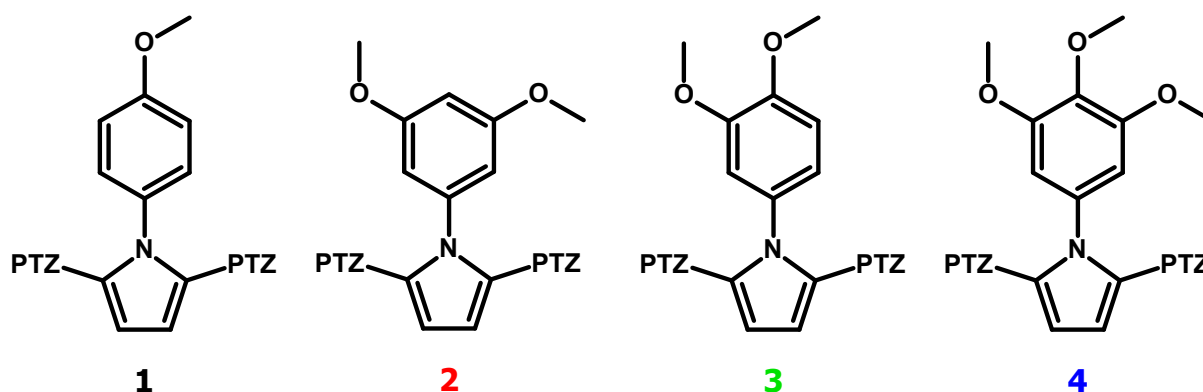
Pochodne pirolu z ugrupowaniami fenotiazynowymi - od struktury molekularnej do właściwości fotofizycznych

Martyna Kubis, Aneta Słodek, Dawid Zych

Instytut Chemii, Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych, Uniwersytet Śląski,
ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice
e-mail: martyna2000.k@gmail.com

Dynamiczny rozwój współczesnej cywilizacji stawia przed naukowcami wyzwanie opracowania nowoczesnych materiałów, które będą funkcjonalne, łatwe do otrzymania, tanie i przystosowane do szerokiego wachlarza zastosowań. Szczególne znaczenie zyskują materiały organiczne przeznaczone do optoelektroniki i bioobrazowania, takie jak organiczne diody elektroluminescencyjne, organiczne ogniwa fotowoltaiczne czy sondy fluorescencyjne. Grupą związków posiadających właściwości umożliwiające ich wykorzystanie w takich aplikacjach są heterocykle zawierające atomy azotu, siarki czy tlenu. Ich właściwości można w prosty sposób modyfikować poprzez odpowiednie podstawienie grupami donorowymi lub akceptorowymi [1,2].

W niniejszej pracy przedstawiono układy oparte na strukturze fenotiazyny, zawierające w centralnej części cząsteczki pochodną pirolu (układy typu fenotiazyna-pirol-fenotiazyna). Związki te zawierają przy atomie azotu pirolu podstawniki fenyłowe różniące się liczbą i/lub pozycją przyłączonych grup metoksyłowych (Rys. 1). Scharakteryzowano je pod kątem właściwości optycznych oraz określono wpływ liczby i położenia grup metoksyłowych na ich właściwości fotofizyczne. Uzyskane wyniki zestawiono z rezultatami obliczeń kwantowo-chemicznych, co umożliwiło interpretację zależności pomiędzy budową molekularną a właściwościami badanych układów.



Rysunek 1: Pochodne fenotiazyna-pirol-fenotiazyna (PTZ=fenotiazyna).

Podziękowanie: Obliczenia wykonano na komputerach Wrocławskiego Centrum Sieciowo Superkomputerowego (<http://www.wcss.pl>), grant obliczeniowy Nr 568.

- [1] García-Valverde M, Torroba T. Sulfur-Nitrogen Heterocycles. *Molecules* 2005;10:318–20.
[2] Chulanova EA, Semenov NA, Pushkarevsky NA, Gritsan NP, Zibarev AV. Charge-transfer chemistry of chalcogen–nitrogen π -heterocycles. *Mendelev Communications* 2018;28:453–60.



S04 PS43

Badanie wpływu składu fotoprzełączalnej matrycy na samoorganizację hybrydowych nanocząstek tlenku żelaza

Gabriela Anna Hryciuk, Michał Wójcik

Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii

g.hryciuk@uw.edu.pl

Azobenzen charakteryzujący się fotoizomeryzacją E/Z umożliwia zdalne sterowanie właściwościami chemicznymi i konformacyjnymi ligandów pod wpływem światła i temperatury [11]. Zmiana konformacji wpływa na właściwości fizykochemiczne cząsteczki, wpływając na proces samoorganizacji nanocząstek w matrycy organicznej [12]. Nanocząstki tlenku żelaza stanowią atrakcyjną platformę do projektowania funkcjonalnych materiałów hybrydowych ze względu na ich właściwości magnetyczne oraz możliwość kontrolowanej modyfikacji powierzchni. Monodispersyjne nanocząstki tlenku żelaza o średnicy 7.2 ± 1.2 nm otrzymano metodą rozkładu termicznego oleinianu żelaza, a następnie funkcjonalizowano ligandem zawierającym motyw azobenzenu oraz terminalną grupę fosfonową umożliwiającą trwałe zakotwiczenie na powierzchni nanocząstek.

Zmodyfikowane nanocząstki wprowadzono do organicznej matrycy, a następnie układy przygotowywano bezpośrednio na siateczkach do transmisyjnej mikroskopii elektronowej (TEM) w celu obserwacji procesów samoorganizacji. W trakcie kontrolowanego chłodzenia zaobserwowano powstawanie struktur tubularnych wynikających ze zwijania się matrycy i organizacji nanocząstek w uporządkowane układy. Dodatkowo, potencjał fotoizomeryzacji grup azowych otwiera możliwość modulacji układów nanocząstek w sposób odwracalny, co umożliwia dynamiczne sterowanie strukturą i właściwościami materiału.

Uzyskane wyniki wskazują, że odpowiednio zaprojektowane ligandy mogą sprzyjać kierowanej samoorganizacji magnetycznych nanocząstek tlenku żelaza, prowadząc do powstawania złożonych nanostruktur o potencjalnym znaczeniu w projektowaniu zaawansowanych materiałów funkcjonalnych, w tym materiałów reagujących na bodźce świetlne.

¹¹ Gao M, Kwaria D, Norikane Y, Yue Y. (2022) Visible-light-switchable azobenzenes: Molecular design, supramolecular systems, and applications. *Natural Sciences*, 3(1). doi:10.1002/ntls.20220020

¹² Jedrych, A., Pawlak, M., Gorecka, E., Lewandowski, W., & Wojcik, M. M. (2023). Light-Responsive Supramolecular Nanotubes-Based Chiral Plasmonic Assemblies. *ACS nano*, 17(6), 5548–5560. doi.org/10.1021/acsnano.2c10955



S04 PS44

Engineering graphene oxide - polyelectrolyte interfaces for tunable memristive properties

Tomasz Kruk¹, Anna Kostecka², Wojciech Wieczorek^{2,3}, Anna Chrzęszcz¹, Tomasz Mazur², Michał Szuwarzyński²

¹Jerzy Haber Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences, Niezapominajek 8, 30-239 Krakow, Poland

²AGH University of Krakow, Academic Centre for Materials and Nanotechnology, Mickiewicza 30, 30-059 Krakow, Poland

³AGH University of Krakow, Faculty of Materials Science and Ceramics, Mickiewicza 30, Krakow 30-059, Poland

e-mail: tomasz.kruk@ikifp.edu.pl

The development of modern nanoelectronics focuses on materials with high conductivity, stability, and compatibility with diverse functional platforms. Graphene oxide (GO) is particularly promising due to its unique properties and tunable structure, enabling applications in next-generation devices such as memristors and neuromorphic systems. Memristors are memory elements whose resistance depends on the history of current flow, while layered LbL structures combining GO with metal or metal oxide nanoparticles enable resistive switching. This mechanism supports the development of artificial synapses and neuromorphic networks that mimic brain functions. The LbL method enables the fabrication of thin, stable, and reproducible active layers. Owing to its layered structure, high specific surface area, and chemical tunability, GO is well suited for high-performance, low-power memristive devices and neuromorphic computing. These technologies may contribute to future intelligent memory systems, flexible electronics, and hardware-based artificial intelligence.

Layer-by-layer (LbL) graphene oxide–polyelectrolyte (GO–PE) multilayers were deposited on indium tin oxide substrates and evaluated for structural, morphological, and resistive switching properties. QCM-D confirmed controlled and reproducible growth of GO–PDADMAC and GO–PEI films, with greater mass uptake for GO–PEI. UV–Vis analysis showed a linear increase in absorbance with bilayer number, indicating uniform film growth and enhanced electronic coupling between GO layers. SEM and AFM revealed complete substrate coverage after four bilayers and parallel stacking of GO nanoflakes with a thickness of ~1.1 nm. The higher roughness and mass loading of GO–PEI suggested stronger interactions between GO and the polyelectrolyte. Electrical measurements demonstrated reproducible bipolar resistive switching between distinct low- and high-resistance states. Above the switching threshold (± 1.2 – 1.5 V), charge transport changed from ohmic to space-charge-limited conduction, suggesting trap-controlled mechanisms. Pulse tests confirmed stable and reversible switching up to ± 2.4 V. Compared with GO–PDADMAC, GO–PEI showed more gradual and controllable potentiation, indicating strong potential for analog switching and neuromorphic applications. Overall, the results clarify the structure–property relationships of GO-based LbL films and highlight their suitability as tunable carbon-based memristive systems.

Acknowledgements:

This research was funded by the National Science Centre of Poland, Sonata Grant no. 2022/47/D/ST5/01751.



S04 PS45

Badania palności rdzeni poliuretanowych płyt warstwowych na bazie biopolioliu

Joanna Paciorek - Sadowska, Marek Isbrandt, Marcin Borowicz, Aleksandra Piotrowska
*Uniwersytet Kazimierza Wielkiego w Bydgoszczy, Wydział Inżynierii Materiałowej, Katedra Chemii
i Technologii Poliuretanów
ul. J. K. Chodkiewicza 30, 85-064 Bydgoszcz
sadowska@ukw.edu.pl*

Poliuretany stanowią ważną grupę materiałów ze względu na ich szerokie zastosowanie w życiu codziennym. Zastosowanie tych materiałów w płytach warstwowych jest bezpośrednio związane z ich właściwościami: fizycznymi (gęstość), mechanicznymi (kruchosć, wytrzymałość na ściskanie), termicznymi (współczynnik przewodzenia ciepła) i przede wszystkim palnością. Ważnym elementem są również aspekty ekonomiczne i środowiskowe, takie jak wpływ na środowisko naturalne. Często dążenie do uzyskania określonych właściwości poliuretanów wiąże się z dodawaniem do formulacji technologicznej substancji pomocniczych i środków zmniejszających palność. Obecne trendy ukierunkowane są na uzyskiwanie ekologicznych rozwiązań produktowych przy jednoczesnym zachowaniu strategii zrównoważonego rozwoju.

Zastosowanie surowca biopoliolowego zawierającego heteroatomy siarki w prowadzonych badaniach do otrzymywania pianek poliizocyjanurowych na jego bazie doprowadziło do poprawy odporności ogniowej tych materiałów. Ponadto przyczyniło się do wyeliminowania toksycznych środków zmniejszających palność na bazie halogenów, np. organicznych chlorofosforanów. Przedstawione badania przyczyniają się do zmniejszenia zużycia surowców petrochemicznych powstających w procesie przetwórstwa ropy naftowej na rzecz łatwo odnawialnych surowców pochodzenia roślinnego. Umożliwia to również zastąpienie toksycznych środków zmniejszających palność w piankach poliuretanowych substancjami niemającymi negatywnego wpływu na środowisko.

Prezentowane badania przedstawiają praktyczne zastosowanie biopolioliu otrzymanego na bazie wybranego „egozytycznego” oleju roślinnego do produkcji sztywnych pianek poliizocyjanurowych dedykowanych do zastosowania w płytach warstwowych. Zbadano również wpływ heteroatomów siarki na palność otrzymanych materiałów. Dokonano tego poprzez badanie uzyskanych materiałów poliuretanowych za pomocą licznych testów palności, w tym: ograniczonego wskaźnika tlenowego (LOI, wg normy ISO 4589), klasyfikacji palności według normy UL94 oraz metody kalorymetrii stożkowej (badanie właściwości ogniowych i dymotwórczych badanych materiałów zgodnie z normą ISO 5660:2015).



S04 PS46

Domieszki do kompozytów cementowych w zrównoważonym budownictwie

Łukasz Kłapiszewski ^{1,2,*}, Piotr Latos ³, Izabela Kłapiszewska ⁴, Agnieszka Śłosarczyk ⁴,
Anna Chrobok ³, Teofil Jesionowski ¹

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

² Interdyscyplinarne Centrum Ekotechnologii, Politechnika Poznańska, Piotrowo 2, 60-965 Poznań

³ Wydział Chemiczny, Politechnika Śląska, B. Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice

⁴ Wydział Inżynierii Lądowej i Transportu, Politechnika Poznańska, Piotrowo 3, 60-965 Poznań

* e-mail: lukasz.klapiszewska@put.poznan.pl

Jednym z głównych problemów związanych ze stosowaniem nanomateriałów w kompozytach cementowych jest ich skłonność do aglomeracji. Powstawanie skupisk cząstek utrudnia uzyskanie jednorodnej dyspersji w matrycy, co może prowadzić do lokalnych różnic w strukturze i właściwościach materiału. W przypadku tlenku cynku (ZnO) dodatkowym ograniczeniem jest jego wpływ na proces hydratacji cementu, w tym możliwość wydłużenia czasu wiązania. Z tego względu istotne jest opracowanie sposobu wprowadzania ZnO, który ograniczy te niekorzystne zjawiska bez pogorszenia podstawowych właściwości zaprawy.

W prezentowanych badaniach zastosowano dwa związki jonowe zawierające ZnO, zaprojektowane jako funkcjonalne dodatki do zapraw cementowych. Związki jonowe są coraz szerzej wykorzystywane w różnych gałęziach przemysłu, natomiast ich zastosowanie w budownictwie pozostaje stosunkowo ograniczone i dotyczy głównie ochrony oraz impregnacji drewna i stali. Włączenie ZnO w strukturę związku jonowego rozpatrywano jako sposób na ograniczenie aglomeracji tlenku cynku i jego niekorzystnego wpływu na proces wiązania, przy jednoczesnym wykorzystaniu jego właściwości przeciwdrobnoustrojowych.

Przygotowane kompozyty oceniono zarówno w stanie świeżym, jak i po stwardnieniu. Analizowano wpływ zastosowanych dodatków na przebieg hydratacji i początek wiązania, właściwości reologiczne oraz parametry mechaniczne zapraw. Badania uzupełniono analizą mikrobiologiczną dojrzałych próbek, której celem była ocena zdolności zmodyfikowanych kompozytów do ograniczania rozwoju mikroorganizmów. Pozwoliło to określić, czy zaproponowane związki jonowe mogą jednocześnie ograniczać problemy związane z obecnością ZnO w środowisku cementowym oraz nadawać materiałowi dodatkową funkcjonalność.

Podziękowania: Praca została zrealizowana w ramach projektu badawczego nr 2022/45/B/ST8/02288 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki.



S04 PS47

Mikrofalowa synteza nanokryształów Cu_3N i Cu_3PdN : struktura, chemia powierzchni i właściwości elektrokatalityczne

Aleksandra Ścigała¹, Robert Szczęsny¹, Marek Trzcinski², Anna Chmielnicka³, Iwona A. Rutkowska³, Paweł J. Kulesza³, Edward Szłyk¹

¹ Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Gagarina 7, 87-100 Toruń

² Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz

³ Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Pasteura 1, 02-093, Warszawa
e-mail: a.scigala@umk.pl

Nanostrukturalne azotki metali przejściowych stanowią klasę materiałów o rosnącym znaczeniu w katalizie elektrochemicznej, szczególnie w reakcjach redukcji małych cząsteczek. Azotek miedzi(I) (Cu_3N) jest półprzewodnikiem o strukturze krystalicznej typu anti-ReO_3 , umożliwiającej wprowadzanie atomów obcych metali do sieci krystalicznej, co może prowadzić do istotnych modyfikacji jego właściwości fizykochemicznych. Pomimo licznych metod fizycznych i chemicznych syntezy Cu_3N , otrzymywanie bimetalicznych azotków miedzi pozostaje nadal ograniczone głównie do technik fizycznego osadzania.

Celem badań była mikrofalowa synteza koloidalnych nanokryształów Cu_3N oraz Cu_3PdN , umożliwiająca precyzyjną kontrolę morfologii nanostruktur w porównaniu z metodami konwencjonalnymi. Zbadano wpływ parametrów syntezy, takich jak temperatura, czas reakcji, stężenie prekursorów oraz procedura oczyszczania, na właściwości otrzymanych materiałów. Przeprowadzono analizę chemii powierzchni nanokryształów z wykorzystaniem spektroskopii w podczerwieni (IR) oraz rentgenowskiej spektroskopii fotoelektronów (XPS), wykazując obecność mieszaniny ligandów organicznych, powstających jako produkty utleniania oleiloaminy. Zbadano aktywność elektrokatalityczną nanokryształów Cu_3N i Cu_3PdN w reakcjach: redukcji dwutlenku węgla (CO_2RR), redukcji tlenu (ORR) oraz redukcji azotanów(V) (NO_3RR). W przypadku nanokryształów Cu_3PdN wykazano, że redukcja CO_2 prowadzi do powstawania kwasu mrówkowego lub formaldehydu, w zależności od rodzaju zastosowanego elektrolitu.

Uzyskane wyniki poszerzają wiedzę na temat projektowania koloidalnych nanokryształów na bazie Cu_3N oraz potwierdzają ich potencjał jako katalizatorów w reakcjach CO_2RR , ORR i NO_3RR .

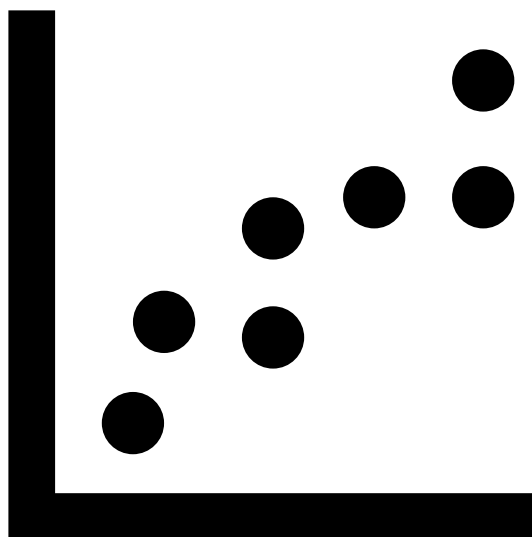
Podziękowania

Badania zostały zrealizowane w ramach projektu badawczego o nr 2021/41/N/ST5/04413 finansowanego ze środków Narodowego Centrum Nauki.



S05

Chemia fizyczna i termodynamika





Wykłady sekcyjne



S05 WS01

Recykling - zielone procesy ekstrakcyjne - kinetyka procesu

Urszula Domańska-Żelazna, Anna Wiśniewska, Zbigniew Dąbrowski, Kamil Wróbel, Michał Skonieczny

Sieć Badawcza Łukasiewicz – Instytut Chemii Przemysłowej imienia Profesora Ignacego Mościckiego, ul. Rydygiera 8, 01-793 Warszawa; Urszula.Domanska-Zelazna@IChP.lukasiewicz.gov.pl

Badano możliwość odzysku cennych metali, takich jak Cu, Fe, Al., Ni, Sn, Pb, Ag, Au z odpadów elektronicznych (głównie z zużytych płyt drukowanych WPCB telefonów komórkowych). Solwometalurgia to zastosowanie różnych rozpuszczalników organicznych, cieczy jonowych i mieszanin DES [1,2]. Praca obejmowała obróbkę WPCM, oczyszczenie, wyprażenie w temperaturze 400°C, 6 h, rozdrobnienie w młynku i przesianie (wielkość ziaren < 2,00 mm). Materiał zawierał 0,27 %wag srebra, 0,73 %wag złota, 23,68 %wag miedzi oraz 2,88 %wag niklu jak również inne metale w małej ilości (poza żelazem, 8,07 %wag) - zawartości metali w uzyskanym materiale oznaczono metodami (SEM/EDS). Ługowanie z fazy stałej przeprowadzono przy użyciu mieszaniny dwu cieczy jonowych (spodziewany efekt synergiczny): chlorek tetrabutylfosfoniowy, $[P_{4,4,4,4}][Cl]$ + mrówczan tetrabutylfosfoniowy $[P_{4,4,4,4}][HCOO]$ z dodatkami TCCA/aceton oraz 50% roztwór DDACl. Określono parametry procesu, selektywność i wydajność ekstrakcji na podstawie pomiarów stężeń jonów metali w roztworach wodnych za pomocą metody (ICP-OES). Uzyskano następujące wydajności ekstrakcji: Cu – 63,3%wag, Sn – 51,11%wag, Fe – 63,8 %wag, Pb – 100%wag, Al – 48,85%wag, Ag – 28,5 %wag, Ni – 51,05% wag, Au – 83,1%wag.

Badania kinetyczne prowadzono w funkcji czasu 30, 60, 90, 120 min w najwyższej temperaturze 45°C, jednokrotna ekstrakcja. Dla wybranych czasów 2h, 3h wykonano pomiary w funkcji temperatury (20, 25, 30, 35, 40, 45°C), jednokrotna ekstrakcja. Badania te pozwoliły na opracowanie modelu kinetycznego ekstrakcji dla siedmiu metali i wyznaczenie energii aktywacji. Wartości współczynnika regresji wskazały na możliwość różnych mechanizmów towarzyszących ekstrakcji różnych metali. Dla większości metali był to model mieszany reakcji powierzchniowej z procesem dyfuzyjnym (Model M) [3].

Wykazano możliwość elektrochemicznego odzysku miedzi z badanej cieczy poekstrakcyjnej. Zaproponowana metoda elektrochemiczna pozwoliła na wydzielenie ok. 94% miedzi z elektrolitu w wyniku czego otrzymano metaliczną miedź o czystości 98-99%, która stanowi gotowy produkt rynkowy (odzysk miedzi na poziomie 59,5% z WPCB). Z roztworu po elektrolizie wyrażono za pomocą dimetylogliksymu w etanolu osad $Ni(DMG)_2$. Z pozostałego przesączu podjęto próbę odzysku Au i Ag za pomocą dwukrotnej ekstrakcji roztworem chlorku triheksylotetradecylfosfoniowego $[P_{6,6,6,14}][Cl]$ w toluenie.

Podziękowanie: Sieć Badawcza Łukasiewicz-Instytut Chemii Przemysłowej imienia Profesora Ignacego Mościckiego, temat nr. 84132507, 2025.

Literatura:

1. A. Łukomska, A. Wiśniewska, D. Dąbrowski, J. Lach, K. Wróbel, D. Kolasa, U. Domańska, Recovery of metals from electronic waste - printed circuit boards by ionic liquids, DESs and organophosphorous-based acids extraction. *Molecules* 2022, 27, 4984.
2. U. Domańska, A. Wiśniewska, Z. Dąbrowski, Recovery of strategic metals from waste printed circuit boards with deep eutectic solvents and ionic liquids. *Processes*, 2024, 12, 530.
3. Domańska. U., Wiśniewska, A., Dąbrowski, D., Wróbel, K. Kolasa, D. Skrzypczyńska, K. Investigation on metal leaching efficiency from the electronic waste of mobile phones - printed circuit boards - using ionic liquids. *J. Mol. Liq.* **2026**, 456, 129611.



S05 WS02

Fizykochemiczne podstawy delaminacji materiałów kompozytowych w recyklingu modułów fotowoltaicznych i szkła laminowanego

Marek Królikowski¹, Piotr Żach²

¹*Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska
Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
marek.krolikowski@pw.edu.pl*

²*Zakład Podstaw Budowy Maszyn, Wydział Samochodów i Maszyn Roboczych, Politechnika Warszawska
Ludwika Narbutta 84, 02-524 Warszawa*

Rosnąca liczba wycofywanych z eksploatacji modułów fotowoltaicznych oraz szyb wykonanych ze szkła laminowanego powoduje dynamiczny wzrost ilości odpadów kompozytowych, których efektywny recykling stanowi jedno z najważniejszych wyzwań gospodarki o obiegu zamkniętym. W obu przypadkach odzysk cennych surowców utrudnia obecność trwałych warstw polimerowych, takich jak kopolimer etylenu z octanem winylu (EVA) oraz poliwinylbutyral (PVB), odpowiedzialnych za trwałe połączenie poszczególnych warstw materiału.

W pracy przedstawiono fizykochemiczne podstawy procesów delaminacji wykorzystujących zjawiska selektywnego pęcznienia i częściowego rozpuszczania polimerów. Omówiono mechanizmy oddziaływań polimer–rozpuszczalnik, wpływ parametrów procesu oraz właściwości rozpuszczalnika, na kinetykę pęcznienia i skuteczność rozdzielania materiałów kompozytowych. Szczególną uwagę poświęcono zależności pomiędzy właściwościami fizykochemicznymi układu a efektywnością odzysku szkła, metali oraz frakcji polimerowych.

Przedstawiono wyniki badań własnych dotyczących delaminacji modułów fotowoltaicznych z zastosowaniem rozpuszczalników organicznych oraz odniesiono je do prowadzonych prac nad recyklingiem szkła laminowanego. Omówiono możliwości wykorzystania metod spektroskopowych i kalorymetrycznych do oceny stopnia zachowania struktury odzyskanych polimerów oraz wpływu procesu delaminacji na ich właściwości fizykochemiczne.

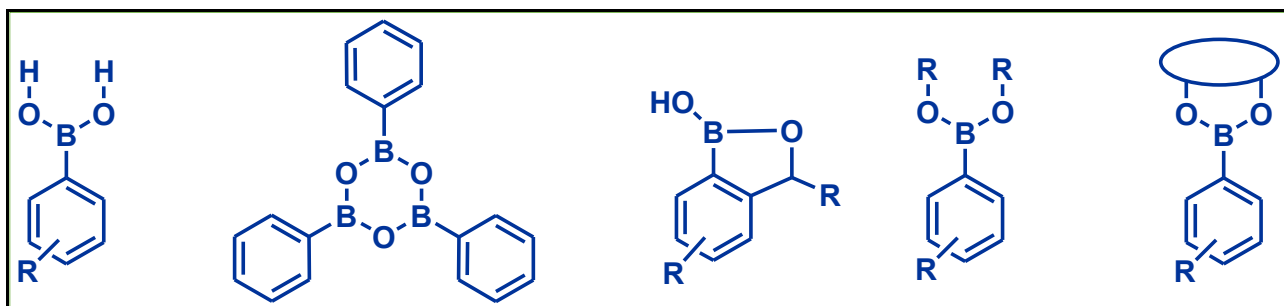
Wykazano, że znajomość mechanizmów pęcznienia i rozpuszczania polimerów oraz świadomy dobór parametrów procesu umożliwiają opracowanie selektywnych metod delaminacji ograniczających zużycie energii i rozpuszczalników przy jednoczesnym zachowaniu wysokiej jakości odzyskiwanych materiałów. Przedstawione zagadnienia wskazują, że chemia fizyczna i termodynamika układów polimer–rozpuszczalnik odgrywają kluczową rolę w projektowaniu nowoczesnych technologii recyklingu materiałów kompozytowych.

Wybrane właściwości związków fenyloboronowych

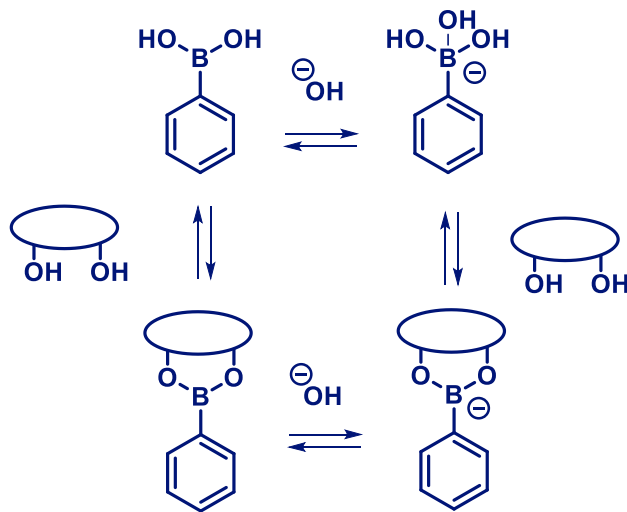
Agnieszka Adamczyk-Woźniak

Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej;
 Katedra Chemii Fizycznej, ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa;
 agnieszka.wozniak@pw.edu.pl

Związki fenyloboronowe (kwas fenyloboronowy, ich bezwodniki, estry oraz benzoksaborole, Rysunek) znajdują szerokie zastosowanie w zarówno w syntezie organicznej (reakcja sprzęgania Suzukiego) jak i w chemii materiałowej (m.in. materiały responsywne) oraz chemii medycznej (tj. leki o unikalnym mechanizmie działania).



Rysunek: od lewej kwas fenyloboronowy, boroksyna, benzoksaborole, estry kwasów fenyloboronowych, estry cykliczne kwasów fenyloboronowych.



Schemat: Złożone równowagi związków fenyloboronowych z *cis*-diolami w roztworach wodnych.

Związki fenyloboronowe są kwasami Lewisa, co wynika z obecności luki elektronowej na atomie boru. Kwasowość wpływa m.in. na oddziaływanie kwasów fenyloboronowych oraz benzoksaboroli z biomolekułami (szczególnie z *cis*-diolami, Schemat), co może stanowić podstawę ich molekularnego mechanizmu działania jako inhibitorów enzymów. Szczególnie istotne są równowagi kwasowo-zasadowe w roztworach wodnych. Oddziaływania grupy boronowej z podstawnikami w pozycji *orto*, decydują o odmiennych właściwościach tych pochodnych w porównaniu z ich izomerami. Właściwości te zostaną omówione na przykładzie kwasów *orto*-formylofenyloboronowych, które wykazują zaskakujące zróżnicowanie struktur w fazie stałej, a w roztworach ulegają cyklizacji.



S05 WS05

Związki chemiczne $\text{ZnCr}_2\text{Se}_4\text{:Nb}$ – synteza i właściwości fizykochemiczne

Autorzy: Izabela Jendrzejewska¹, Ewa Pietrasik¹, Tomasz Goryczka², Zbigniew Stokłosa²

1. *Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski, ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice*
2. *Instytut Inżynierii Materiałowej, Uniwersytet Śląski, ul. 75 Pułku Piechoty 1a, 41-500 Chorzów*

W temperaturze pokojowej, spinel ZnCr_2Se_4 wykazuje właściwości półprzewodnikowe typu *p*. Posiada spiralną strukturę magnetyczną (kąt spirali $\phi = 42 \pm 1^\circ$), temperaturę Néela równą 21 K, dodatnią wartością paramagnetycznej temperatury Curie-Weissa ($\theta_{CW} \sim 90$ K) i stałą molową $C_M = 3,54$ K/mol [1,2]. Wartość momentu magnetycznego w stanie nasycenia wynosi $\mu_{sat} = 6,1 \mu_B$, a momentu efektywnego $\mu_{eff} = 5,90 \mu_B$ [3]. Parametr sieciowy *a* wynosi 10,4891 Å, zaś parametr anionowy *u* ma wartość 0,253 [4].

W tym związku dominują dwa typy oddziaływań:

1. oddziaływania Cr-Se-Cr ferromagnetyczne
2. oddziaływania Cr-Se-Se-Cr antyferromagnetyczne

W ZnCr_2Se_4 , momenty magnetyczne jonów Cr^{3+} tworzą poniżej temperatury Néela płaską spiralę antyferromagnetyczną, a w płaszczyźnie (001) są uporządkowane ferromagnetycznie, o czym świadczy wysoka i dodatnia wartość paramagnetycznej temperatury Curie-Weissa. Komórka elementarna ZnCr_2Se_4 zbudowana jest z jonów Se^{2-} , obsadzających pozycje węzłowe $32e$ (*SG* nr 227) oraz jonów Zn^{2+} , zajmujących 1/8 pozycji tetraedrycznych $8a$ i jonów Cr^{3+} , które zajmują 1/2 pozycji oktaedrycznych $16d$. Obecność nieobsadzonych luk w podsięciach: tetraedrycznej i oktaedrycznej, stwarza możliwość podstawienia jednego pierwiastka drugim w dużym zakresie stężeń. Dzięki temu właściwości fizykochemiczne ZnCr_2Se_4 można modyfikować za pomocą domieszek wprowadzanych do jego sieci.

Związki chemiczne o ogólnym wzorze $\text{ZnCr}_2\text{Se}_4\text{:Nb}$ otrzymano w wyniku wysokotemperaturowego spiekania stechiometrycznych ilości ZnSe , Nb_2Se_3 i Cr_2Se_3 w warunkach wysokiej próżni. Dla otrzymanych związków wyznaczono składy chemiczne (SEM) oraz określono strukturę metodą dyfrakcji rentgenowskiej.

Właściwości magnetyczne wyznaczono przy użyciu magnetometru nadprzewodzącego SQUID, natomiast właściwości cieplne wyznaczono za pomocą systemu Labsys Evo. Analiza rentgenowska wykazała, że otrzymano związki jednofazowe o strukturze spinelu. Wyznaczone wartości parametrów sieciowych rosną wraz ze wzrostem ilości wbudowanego niobu. Badania magnetyczne wykazały obniżenie paramagnetycznego punktu Curie-Weissa, co wskazuje na wzrost oddziaływań antyferromagnetycznych. Na krzywych DSC obserwuje się słaby, szeroki pik endotermiczny, co wskazuje na trwałość badanych próbek do temperatury ok. 1200°C.

1. P. K. Baltzer, H. W. Lehmann, M. Robbins, *Phys. Rev. Lett.*, 1965, **15**, 493.
2. A. Menth, A. R. von Neida, L. K. Schick, D. L. Malm, *J. Phys. Chem. Solids*, 1972, **32**, 1338.
3. G. Bush, B. Magyar, O. Vogt, *Solid State Comm.*, 1969, **7**, 509.
4. J. Hemberger, H.-A. Krug von Nidda, V. Tsurkan, A. Loidl, *arXiv: cond-mat/0607811*, 2006.



S05 WS06

Nanolitograficznie indukowane azotowanie wybranych materiałów dwuwymiarowych

Robert Szoszkiewicz (1), Saeed Sovizi (1), Marcin Pisarek (2)

(1) *WCh, CNBCh, UW*
Żwirki Wigury 101, 02-089 Warszawa
rszoszkiewicz@chem.uw.edu.pl

(2) *ICChF PAN, Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa*

Ze względu na swoje unikalne właściwości i funkcjonalności, dwusiarczek molibdenu znalazł szerokie zastosowanie w optoelektronice, pozyskiwaniu energii oraz katalizie. Co więcej, wykazano, że właściwości tego materiału można modyfikować zarówno poprzez utlenianie termiczne jak i obróbkę plazmową. Niemniej jednak, azotowanie tego materiału jest wciąż słabo zbadane. W niniejszym wystąpieniu skupię się na azotowaniu pojedynczych krystalitów MoS_2 w mikroskali. Eksperymenty te zostały przeprowadzone dzięki napięciu elektrycznemu przyłożonemu między ostrzem belki skanującej mikroskopu AFM a badaną próbką w obecności cząsteczek wody promujących utlenianie (ang. oxidation scanning probe lithography, o-SPL). Dzięki zastosowaniu mikroskopii sił atomowych z sondą Kelvina oraz spektroskopii elektronów Augera stwierdziliśmy, że metoda o-SPL umożliwia jednoczesne utlenianie i azotowanie płatków MoS_2 w przypadku przyłożenia stosunkowo wysokiego napięcia między ostrzem skanującej belki a mikro-krystalitami MoS_2 . Pokazaliśmy, że w takich warunkach dochodziło do wbudowania atomów tlenu i azotu oraz zastąpienia nimi atomów siarki w strukturze MoS_2 . Jednocześnie zaobserwowano znaczne zmiany topografii powierzchni, wynikające głównie z rozwarstwienia próbki. Zastosowanie niższego napięcia między ostrzem a płatkami MoS_2 prowadziło zaś do zatrzymania procesów utleniania i azotowania, ale wciąż do istotnych zmian topografii związanych z odsiarczaniem kryształów MoS_2 .

Referencja:

S. Sovizi, M. Pisarek, R. Szoszkiewicz, Nitrogenation of microscopic MoS_2 surfaces by oxidation scanning probe lithography, *Journal of Chemical Physics*, AIP, 165(1), 014704 (2026). DOI: 10.1063/5.0337848.



S05 WS07

Badanie procesów asocjacji w układach zróżnicowanych strukturalnie w zmiennych warunkach termodynamicznych

Barbara Hachuła¹, Anjana Krishna Sudhakaran Nair Valsala Kumari², Paulina Jesionek-Ratka², Patryk Włodarczyk³, Magdalena Tarnacka², Ewa Kamińska⁴, Kamil Kamiński²

¹*Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach, ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice
e-mail barbara.hachula@us.edu.pl*

²*Instytut Fizyki im. Augusta Chelkowskiego, Uniwersytet Śląski w Katowicach
ul. 75 Pułku Piechoty 1, 41-500 Chorzów*

³*Sieć Badawcza Łukasiewicz - Instytut Metali Nieżelaznych, ul. Sowińskiego 5, 44-100 Gliwice*

⁴*Katedra i Zakład Farmakognozji i Fitochemii, Wydział Nauk Farmaceutycznych w Sosnowcu, Śląski Uniwersytet Medyczny w Katowicach, ul Jagiellońska 4, 41-200 Sosnowiec*

Asocjacja cząsteczek determinuje właściwości fizykochemiczne materii, co czyni ją fundamentalnym zagadnieniem dla chemii, inżynierii materiałowej czy farmacji. W badaniach tego procesu szczególną rolę odgrywają dwa kluczowe parametry: temperatura oraz ciśnienie. W niniejszym wykładzie przedstawione zostaną wyniki badań spektroskopowych zróżnicowanych strukturalnie substancji asocjujących, tj. 2-etylo-1-heksanol, 2-etylo-1-heksyloamina, 3-fenylpropanal, 3,5-dimetyloadamantan-1-amina (memantyna) poddanych różnym warunkom termodynamicznym.

Badania eksperymentalne pochodnych heksanu, wsparte obliczeniami teoretycznymi, wykazały, że przesunięcia pasm drgań rozciągających wiązań X-H (gdzie X = O, N) pod wpływem kompresji nie wynikają głównie ze skrócenia wiązań wodorowych na skutek wzrostu gęstości układu. Siłą napędową obserwowanych zmian spektralnych jest kooperatywne wzmocnienie wiązań wodorowych wywołane intensyfikacją agregacji molekularnej.¹ Badania 2-etylo-1-heksanolu wzdłuż różnych izolinii termodynamicznych pozwoliły na rozdzielenie wpływu energii termicznej od efektów gęstościowych wywołanych kompresją. Wykazano, że głównym parametrem kontrolującym zachowanie międzycząsteczkowych wiązań wodorowych oraz strukturę asocjatów jest temperatura, podczas gdy rola zmian gęstości (ciśnienia) pozostaje drugorzędna.² W przypadku 3-fenylpropanalu, pod wpływem kompresji powstają większe, gęściej upakowane agregaty aniżeli w niskich temperaturach, a proces ten jest zdominowany przez oddziaływania typu π -stacking oraz silne, nieliniowe wiązania wodorowe.³ Badania nad memantyną wskazują, że jej zachowanie fazowe silnie zależy od drogi przemiany – izobaryczne chłodzenie prowadzi do powstania fazy kryształu plastycznego, podczas gdy izotermiczna kompresja pozwala zachować stan ciekły.⁴ Zaprezentowane wyniki pokazują, że modyfikacje temperatury i ciśnienia zmieniają strukturę asocjacyjną i zachowanie fazowe układów molekularnych. Poznanie tych specyficznych, molekularnych mechanizmów jest niezbędne do celowego projektowania zaawansowanych materiałów.

Podziękowanie: Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki przyznanych na podstawie decyzji numer: 2021/41/B/NZ7/01654 (Opus 21) oraz 2022/47/B/ST4/00236 (Opus 24).

1. B. Hachuła, P. Włodarczyk, K. Jurkiewicz, J. Grelska, D. Scelta, S. Fanetti, M. Paluch, S. Pawlus, K. Kamiński, *J. Phys. Chem. Lett.* 2024, 15, 1, 127–135. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.3c03037.

2. B. Hachuła, E. Kamińska, K. Koperwas, R. Wrzalik, K. Jurkiewicz, M. Tarnacka, D. Scelta, S. Fanetti, S. Pawlus, M. Paluch, K. Kamiński, *Spectrochim. Acta A* 2022, 283, 121726. <https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.121726>.

3. A. K. Sudhakaran Nair Valsala Kumari, B. Hachuła, P. Włodarczyk, M. Tarnacka, K. Witkiewicz, R. Wrzalik, E. Kamińska, K. Kamiński, *J. Phys. Chem. Lett.* 2026, 17, 3, 728–736. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.5c03496.

4. A. K. Sudhakaran Nair Valsala Kumari, P. Jesionek-Ratka, B. Hachuła, P. Włodarczyk, M. Tarnacka, E. Kamińska, K. Kamiński, *Spectrochim. Acta A* 2026, 128378, <https://doi.org/10.1016/j.saa.2026.128378>.



S05 WS08

Fizykochemiczne podstawy transportu wewnątrzkomórkowego i ich znaczenie dla fizjologii i stresu

Karina Kwapiszewska

*Instytut Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk;
Ul. M. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa;
kkwapiszewska@ichf.edu.pl*

Cytoplazma komórkowa jest dynamicznym, wieloskładnikowym układem materii miękkiej, którego właściwości fizyczne bezpośrednio wpływają na transport cząsteczek, szybkość reakcji biochemicznych i zdolność komórki do utrzymania homeostazy. W warunkach fizjologicznych jej nanostruktura pozostaje zaskakująco stabilna w różnych ludzkich liniach komórkowych. Jednocześnie cytoplazma nie może być opisywana za pomocą jednej wartości lepkości: małe cząsteczki poruszają się w środowisku o charakterze cieczy, natomiast większe kompleksy doświadczają coraz silniejszego ograniczenia ruchu, a obiekty o promieniach większych niż 50 nm zostają uwięzione w żelowej sieci wewnątrzkomórkowej.

Stabilność ta ulega jednak przełamaniu w odpowiedzi na silny stres. Podczas długotrwałego niedoboru składników odżywczych komórki tracą wodę, zmniejszają objętość i zagęszczają swoją wewnętrzną strukturę. Prowadzi to do zwężenia porów cytoplazmatycznych, zahamowania ruchu dużych podjednostek rybosomalnych i ograniczenia translacji. Z fizycznego punktu widzenia komórka przechodzi w stan częściowego „zamrożenia” transportu, co umożliwia redukcję wydatków energetycznych i czasowe wejście w stan spoczynkowy. Co istotne, zmiany te dotyczą przede wszystkim cytoplazmy, podczas gdy transport w jądrze pozostaje relatywnie stabilny, wskazując na przestrzennie zróżnicowaną odpowiedź ochronną.

Jeszcze gwałtowniejszą zmianę obserwuje się podczas śmierci komórki – apoptozy, kiedy nanolepkość cytoplazmy wzrasta kilkukrotnie w krótkim czasie. Główną przyczyną jest fizyczny wypływ wody i skurczenie komórki, a nie mechanizmy biomolekularne, jak aktywność kaspaz czy reorganizacja cytoszkieletu. Nagłe spowolnienie transportu w nanoskali okazuje się więc jednym z fizycznych wyznaczników śmierci komórkowej.

Wyniki te wskazują, że nanolepkość i organizacja cytoplazmy nie są biernym tłem dla procesów biologicznych, lecz aktywnymi elementami regulacji metabolizmu, odpowiedzi na stres i losu komórki. Otwiera to możliwość wykorzystania transportu molekularnego jako ilościowego markera stanu komórki oraz jako nowego celu w projektowaniu terapii, systemów dostarczania leków i strategii modulowania aktywności komórkowej.



S05 WS09

Izobaryczna pojemność cieplna nanofluidów jonowych

Marzena Dzida¹, Krzysztof Cwynar¹, Anna Kolanowska¹, Sławomir Boncel^{2,3}

¹Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach, Szkolna 9, 40-006 Katowice, Polska

²Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Organicznej, Bioorganicznej i Biotechnologii, NanoCarbon Group, Politechnika Śląska, ul. Bolesława Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice, Polska

³Centrum Elektroniki Organicznej i Nanohybrydowej (CONE), Politechnika Śląska, ul. Stanisława Konarskiego 22B, 44-100 Gliwice, Polska
marzena.dzida@us.edu.pl

Obszerna literatura przedmiotu dotycząca izobarycznej pojemności cieplnej nanofluidów jonowych obejmująca 323 opisane układy obfituje we wzajemnie sprzeczne wyniki dla identycznych układów co na tej podstawie nie pozwala na rozstrzygnięcie rzeczywistego wpływu nanostruktur na izobaryczną pojemność cieplną nanofluidów jonowych. W celu weryfikacji tego wpływu zbadaliśmy, wykorzystując dokładny kalorymetr typu Tian Calvet, izobaryczną pojemność cieplną 64 nanofluidów jonowych zawierających wielościenne nanorurki węglowe, w tym funkcjonalizowane nanorurki węglowe [1]. W każdym przypadku bezwzględna zmiana izobarycznej pojemności cieplnej nie przekraczała 3,0% w zakresie temperatury 293,15 – 323,15 K, co jednoznacznie wskazuje na brak istotnego wpływu nanorurek węglowych na izobaryczną pojemność cieplną nanofluidów jonowych. W poszukiwaniu metody uzyskania realnego wzrostu izobarycznej pojemności cieplnej nanofluidów jonowych otrzymaliśmy nowy materiał kompozytowy na bazie nanonurek węglowych in-house 16h MWCNTs (długość 780 μm , średnica 60–80 nm) [2], których powierzchnia została pokryta nylonem w dwóch wariantach, wykorzystując nanorurki węglowe in-house 16h MWCNTs zawierające wodę oraz nanorurki węglowe in-house 16h MWCNTs bez wody. W temperaturze 298,15 K kompozyt in-house 16h MWCNTs-nylon zawierający wodę posiada izobaryczną pojemność cieplną większą o 66% względem czystego in-house 16h MWCNTs, natomiast kompozyt in-house 16h MWCNTs-nylon bez wody posiada izobaryczną pojemność cieplną większą o 38% w porównaniu do in-house 16h MWCNTs. Otrzymane kompozyty stanowią pierwszy krok w kierunku realnego zwiększenia izobarycznej pojemności cieplnej nanofluidów jonowych.

Praca finansowana z projektu Narodowego Centrum Nauki: 2021/41/B/ST5/00892.

[1] K. Cwynar, J. Dziadosz, Ł. Scheller, E. Zorębski, R. Jędrzyśiak, A. Kolanowska, A. Blacha, S. Boncel and M. Dzida, *J. Mol. Liq.*, 2023, **381**, 122535.

[2] B. Jóźwiak, Ł. Scheller, H. F. Greer, K. Cwynar, K. Urbaniec, G. Dzido, J. Dziadosz, R. Jędrzyśiak, A. Kolanowska, A. Blacha, S. Boncel and M. Dzida, *J. Mol. Liq.*, 2023, **391**, 123329.



S05 WS10

Ciecze jonowe jako nowej generacji dodatki do płynów chłodniczych w technologii chłodnictwa absorpcyjnego

Marta Królikowska

*Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny
Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
marta.krolikowska@pw.edu.pl*

Postępujący rozwój cywilizacyjny wiąże się z systematycznym wzrostem zapotrzebowania na energię, w tym energię wykorzystywaną do wytwarzania ciepła i chłodu. Jednocześnie znaczna część energii cieplnej powstającej w procesach przemysłowych oraz w elektrociepłowniach i elektrowniach jest bezpowrotnie tracona, będąc odprowadzana do otoczenia jako ciepło odpadowe. Wykorzystanie tego ciepła stanowi jedno z kluczowych wyzwań współczesnej energetyki, zarówno z ekonomicznego, jak i środowiskowego punktu widzenia. Obiecującym rozwiązaniem są absorpcyjne urządzenia chłodnicze, które do napędu procesu wykorzystują energię cieplną zamiast energii elektrycznej. Urządzenia te charakteryzują się prostą konstrukcją, możliwością zagospodarowania ciepła odpadowego oraz zastosowaniem wody jako przyjaznego dla środowiska czynnika chłodniczego.

O efektywności chłodziarek absorpcyjnych decydują przede wszystkim właściwości stosowanych płynów roboczych. Obecnie w zastosowaniach przemysłowych dominują dwa typy układów: amoniak–woda oraz bromek litu - woda. Każdy z nich posiada jednak istotne ograniczenia, takie jak toksyczność i wybuchowość amoniaku oraz korozyjność i skłonność do krystalizacji wodnych roztworów bromku litu. Z tego względu intensywnie poszukuje się nowych płynów roboczych oraz dodatków modyfikujących właściwości układów stosowanych komercyjnie.

W ramach przeprowadzonych badań wykazano, że dodatek niewielkich ilości nielotnych i higroskopijnych związków do układu $\{\text{LiBr} + \text{H}_2\text{O}\}$ prowadzi do istotnego zwiększenia rozpuszczalności bromku litu w wodzie i ograniczenia zjawiska krystalizacji. Jako potencjalne dodatki przebadano przede wszystkim ciecze jonowe, a także związki obojętne, glikole i etery koronowe. Analiza równowag fazowych (ciało stałe–ciecz) pozwoliła określić wpływ budowy chemicznej oraz stężenia dodatków na rozpuszczalność LiBr i wytypować najbardziej efektywne związki. Dla wybranych układów przeprowadzono kompleksową charakterystykę termodynamiczną i fizykochemiczną, obejmującą pomiary prężności pary, gęstości oraz lepkości w szerokim zakresie temperatury i składu. Uzyskane wyniki stanowią cenne źródło danych do projektowania nowych, bardziej efektywnych płynów roboczych oraz rozwoju nowoczesnych absorpcyjnych urządzeń chłodniczych.

Literatura:

1. Królikowska, M., Zawadzki, M., Skonieczny, M., J. Mol. Liq. 265 (2018) 316–326.
2. Królikowska, M., Romańska, K., Paduszyński, K., Skonieczny, M., Fluid Phase Equilib. 519 (2020) 112640.
3. Królikowska, M., Świtalska, N., Zawadzki, M. Fluid Phase Equilib. 585 (2024) 114164.



Komunikaty sekcyjne

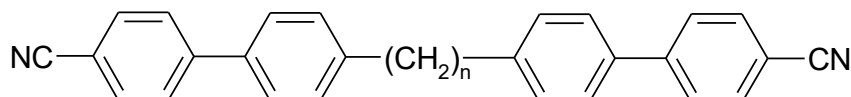
Wpływ struktury związków kalamitycznych na stabilność nematycznej fazy ciekłokrystalicznej typu twist-bend

Marzena Tykarska, Barbara Klucznik

*Instytut Chemii, Wojskowa Akademia Techniczna
ul. gen. Sylwestra Kaliskiego 2, 00-908 Warszawa;
marzena.tykarska@wat.edu.pl*

Faza nematyczna typu twist-bend (N_{TB}) jest fazą ciekłokrystaliczną tworzoną przez niechiralne cząsteczki o specyficznym kształcie [1]. Zawierają one w swojej strukturze dwa sztywne rdzenie, które są połączone giętym łańcuchem alkilowym. Przykład takiej struktury został przedstawiony na rys. 1 dla szeregu homologicznego CBnCB. Cząsteczki takie, zwane bimezogenami, tworzą makroskopową strukturę helikalną, pomimo że nie są chiralne. Temperaturowy zakres występowania fazy N_{TB} tworzonej przez czyste związki jest bardzo wąski. Bardzo często faza ta jest monotropowa, czyli występuje poniżej temperatury topnienia i można ją zbadać tylko podczas chłodzenia. Jednym ze sposobów obniżania temperatury topnienia, zwiększającej temperaturowy zakres istnienia fazy monotropowej, jest tworzenie mieszanin. Badania zostały przeprowadzone pod kątem wykorzystania do tego celu klasycznych monomezogenów, czyli związków kalamitycznych.

Do badań mieszalności zostały wybrane bimezogeny CBnCB, gdzie $n = 7, 9, 11$, oraz ich analogi zawierające atom fluoru w pozycji lateralnej oraz monomezogeny różniące się budową sztywnych rdzeni (dwu-, trój i czteropierścieniowe, zawierające również grupy estrowe), długością terminalnych łańcuchów alkilowych i rodzajem terminalnych grup polarnych ($-NCS$, $-F$, $-Br$, $-C_5H_{11}$, $-COC_5H_{11}$, $-C_{10}H_{21}$, $-COC_9H_{19}$). Niektóre wyniki zostały już opublikowane [2].



Rysunek 1. Struktura bimezogenów CBnCB

Badania są finansowane przez Wojskową Akademię Techniczną, nr grantu UGB 22-094.

[1] M. Cestari et al., Phys. Rev E, 84, (2011), 031704

[2] M. Tykarska et al., Materials, 17, (2024), 4256

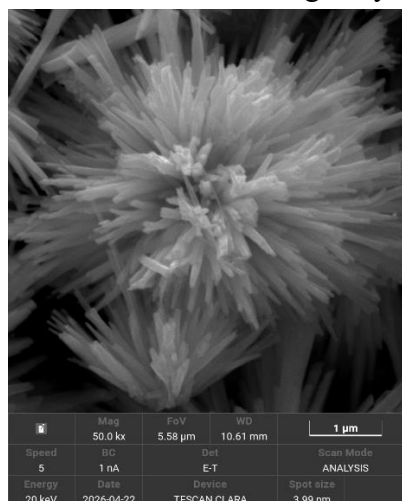
Kontrolowana nanoflorystyka: wpływ polimerów na morfologię nanokwiatków Bi_2S_3 otrzymywanych metodą hydrotermalną - kwitnąca chemia nanostruktur

Anna Kolanowska, Martyna Michalska, Marzena Dzida

Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
 anna.kolanowska@us.edu.pl

Nanomateriały, dzięki swoim unikalnym właściwościom fizykochemicznym wynikającym z ich rozmiaru, morfologii oraz rozwiniętej powierzchni właściwej, stanowią obecnie jedną z dynamicznie rozwijających się dziedzin nauki o materiałach. Jedną z interesujących grup nanomateriałów są nanokwiatki, które cieszą się rosnącym zainteresowaniem ze względu na wysoki stosunek powierzchni do objętości oraz hierarchiczną strukturę. Wśród nanokwiatków na szczególną uwagę zasługują nanokwiatki siarczku bizmutu(III) (Bi_2S_3), zbudowane z licznych, promieniście ułożonych płatków (**Rys. 1**). Taka specyficzna morfologia wpływa na właściwości fizykochemiczne materiału, zwłaszcza właściwości tribologiczne. Warstwowa budowa Bi_2S_3 , związana ze słabymi oddziaływaniami międzywarstwowymi, sprzyja łatwemu przesuwaniu się sąsiadujących warstw (płatków), rozpadowi struktur na płatki i ich adsorpcji na powierzchni metalowej. Ich struktura zapobiega aglomeracji, umożliwia tworzenie ciągłej, jednolitej warstwy zmniejszając tarcie i zmniejsza zużycie materiału, co czyni ten nanomateriał interesującym kandydatem do zastosowań jako stały środek smarny. Jednocześnie rozmiar, kształt oraz sposób ułożenia płatków tworzących nanokwiatki mogą wpływać na ich zachowanie podczas tarcia i zużycia.

Celem badań jest określenie wpływu dodatku glikolu polietylenowego (PEG) oraz *N*-poliwinylopirolidonu (PVP) o różnych masach molowych (PEG 400, 2000, 6000, PVP 10000, 40000, 360000) na morfologię nanokwiatków Bi_2S_3 otrzymywanych metodą hydrotermalną. Szczególna uwaga zostanie poświęcona zależności pomiędzy rodzajem i masą molową zastosowanego polimeru (materiałem porównawczym będą nanokwiatki Bi_2S_3 syntezowane bez dodatku polimeru) a kształtem, rozmiarem oraz strukturą płatków tworzących nanokwiatki. Otrzymane materiały zostaną scharakteryzowane z wykorzystaniem analizy termogravimetrycznej (TGA), spektroskopii ramanowskiej oraz skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM). Uzyskane wyniki pozwolą na lepsze poznanie wpływu modyfikatorów polimerowych na proces formowania nanokwiatków Bi_2S_3 i mogą stanowić podstawę do projektowania nanostruktur o kontrolowanej morfologii i potencjalnie korzystnych właściwościach tribologicznych.



Rys. 1. Zdjęcie SEM nanokwiatka Bi_2S_3 .



S05 KS03

Wpływ obecności granicy faz dwutlenek węgla-woda na szybkość nukleacji hydratu CO₂

Joanna Grabowska¹, Samuel Blazquez², Carlos Vega², Eduardo Sanz²

¹ Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. G. Narutowicza 11/12, Gdańsk, Polska;

² Dept. de Química Física I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madryt, Hiszpania

adres korespondencyjny: joanna.grabowska@pg.edu.pl

Hydraty gazowe (klatraty) są krystalicznymi ciałami stałymi, w których cząsteczki gazów (np. CO₂, CH₄) uwięzione są w klatkach utworzonych przez cząsteczki wody połączone wiązaniami wodorowymi. Zrozumienie mechanizmu ich powstawania ma kluczowe znaczenie zarówno dla kontroli przepływu w rurociągach przemysłowych (tzw. flow assurance), jak i dla technologii sekwestracji dwutlenku węgla oraz magazynowania energii. Badania eksperymentalne wydają się wskazywać, że nukleacja hydratów następuje na granicy faz między roztworem wodnym a fazą bogatą w cząsteczkę gościa, gdzie stężenie gościa jest lokalnie wyższe. Ze względu na niewielkie rozmiary oraz krótki czas życia zarodków, bezpośrednia obserwacja pierwszych etapów procesu nukleacji hydratów metodami doświadczalnymi pozostaje jednak niedostępna.

W niniejszych badaniach przeanalizowany został proces nukleacji hydratów dwutlenku węgla przy użyciu symulacji dynamiki molekularnej (MD) w warunkach głębokiego przechłodzenia i wysokiego ciśnienia ($T = 255$ K, $P = 400$ bar), z wykorzystaniem metody szczepienia ("Seeding"). Rozpatrywanych było sześć charakterystycznych lokalizacji zarodka względem granicy faz oraz kształtów zarodka hydratu (w głębi fazy wodnej, stycznie do granicy faz oraz w różnych stopniach zanurzenia w rezerwuarze CO₂).

Uzyskane wyniki pokazały, że w rozpatrywanych warunkach nukleacja hydratu CO₂ zachodzi preferencyjnie w głębi fazy wodnej, a nie na granicy faz. Wysokość bariery energetycznej dla nukleacji okazała się być w tym przypadku znacznie niższa w porównaniu do obszaru międzyfazowego, a wyznaczona szybkość nukleacji była o 6 do 11 rzędów wielkości wyższa w głębi roztworu. Ponadto, symulacje spontanicznej nukleacji hydratu pokazały, że zarodek powstaje w obszarach o lokalnie podwyższonym stężeniu CO₂ pojawiających się stochastycznie w głębi roztworu. Rezultaty badań wskazują więc, że obecność granicy faz CO₂-woda nie przyspiesza nukleacji, a może wręcz zaburzać ten proces, przynajmniej w rozpatrywanych warunkach temperatury i ciśnienia. Na podstawie uzyskanych wyników można wnioskować, że obserwowana eksperymentalnie obecność hydratów na granicy faz między fazą wodną i fazą cząsteczek gościa niekoniecznie jest wynikiem nukleacji na tej granicy, a związana być może z etapem szybkiego wzrostu kaskadowego (wymagającego masowego dopływu CO₂ z rezerwuaru) lub z heterogeniczną nukleacją na ściankach naczynia pomiarowego.

Podziękowania: J. G. składa podziękowania polskiej infrastrukturze obliczeniowej PLGrid (PLG/2025/018076 w ACK Cyfronet AGH) oraz Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej (CI TASK) za udostępnienie zasobów obliczeniowych. S. B, C. V oraz E. S. składają podziękowania Hiszpańskiemu Ministerstwu Nauki, Innowacji i Uniwersytetów (projekt PID2022-136919NB-C31) za wsparcie finansowe projektu.



S05 KS04

Wpływ funkcjonalizowanych nanorurek węglowych na właściwości fizykochemiczne nanofluidów jonowych bazujących na tiocyjanianie 1-etylo-3-metyloimidazoliowym

Katarzyna Kaczmarek¹, Izabela Białek¹, Karolina Gruszka¹, Krzysztof Cwynar¹,
Anna Kolanowska¹, Sławomir Boncel^{2,3}, Marzena Dzida¹

¹*Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach, Szkolna 9, 40-006 Katowice, Polska*

²*Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Organicznej, Bioorganicznej i Biotechnologii, NanoCarbon Group, Politechnika Śląska, ul. Bolesława Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice, Polska*

³*Centrum Elektroniki Organicznej i Nanohybrydowej (CONE), Politechnika Śląska, ul. Stanisława Konarskiego 22B, 44-100 Gliwice, Polska
katarzyna.kaczmarek@us.edu.pl*

Nanofluidy jonowe (INFs) stanowią nowoczesną klasę cieczy roboczych do zastosowań związanych z wymianą ciepła. W tego typu zastosowaniach kluczowe jest uzyskanie INFs charakteryzujących się możliwie najwyższym przewodnictwem cieplnym przy jednoczesnym zachowaniu jak najniższej lepkości. Wykazano, że INFs zawierające utlenione nanorurki węglowe, in-house 16h MWCNTs-COOH (długość < 500 μm , średnica $\approx$ 50 nm, zawartość grup $-\text{COOH}$: 1,0 $\text{mmol}\cdot\text{g}^{-1}$, grup $-\text{OH}$: 0,4 $\text{mmol}\cdot\text{g}^{-1}$), cechują się niższą lepkością niż układy zawierające nieutlenione nanorurki węglowe in-house 16h MWCNTs (długość 780 μm , średnica 60–80 nm) [1]. W niniejszej pracy zbadano wpływ dodatku funkcjonalizowanych nanorurek węglowych in-house 16h MWCNTs-COOH oraz Nanocyl NC7000 MWCNTs-COOH (długość 1,5 μm , średnica 9,5 nm, zawartość grup $-\text{COOH}$: 4,0 $\text{mmol}\cdot\text{g}^{-1}$, grup $-\text{OH}$: 1,8 $\text{mmol}\cdot\text{g}^{-1}$), a także niefunkcjonalizowanych nanorurek węglowych in-house 16h MWCNTs, zdyspergowanych w tiocyjanianie 1-etylo-3-metyloimidazoliowym ([EMIm][SCN]) przy różnych udziałach masowych, na właściwości INFs. W każdym z badanych układów całkowite stężenie nanorurek węglowych utrzymywano na poziomie 1,0% wag.

Badania wykazały, że INF zawierający 0,75% wag. in-house 16h MWCNTs oraz 0,25% wag. in-house 16h MWCNTs-COOH osiągnął przewodnictwo cieplne o 0,4% niższe niż INF zawierający 1,0% wag. in-house 16h MWCNTs w temperaturze 298,2 K, przy jednoczesnym obniżeniu lepkości o 31% w temperaturze 298,15 K i przy szybkości ścinania 50 s^{-1} .

Takie połączenie właściwości fizykochemicznych jest szczególnie pożądane, ponieważ umożliwia efektywny transport ciepła przy niskich oporach przepływu, co sprawia, że otrzymane nanofluidy jonowe stanowią obiecujące ciecze robocze do zastosowań związanych z wymianą ciepła.

Praca finansowana z projektu Narodowego Centrum Nauki: **2021/41/B/ST5/00892**.

[1]. B. Józwiak, Ł. Scheller, H. F. Greer, K. Cwynar, K. Urbaniec, G. Dzido, J. Dziadosz, R. Jędrzyśiak, A. Kolanowska, A. Blacha, S. Boncel and M. Dzida, *J. Mol. Liq.*, 2023, **391**, 123329.



S05 KS05

Rola membran lipidowych w mechanizmie aktywności i selektywności hinokitiolu

Beata Wyżga, Karolina Olechowska, Katarzyna Hąc-Wydro

Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii
30-387 Kraków, Gronostajowa 2
e-mail: beata.wyzga@uj.edu.pl

Hinokitiol (β -thujaplicin, 2-hydroksy-4-izopropyl-2,4,6-cykloheptatrien-1-on) występuje w korze i korzeniach drzew z rodziny cyprysowatych (*Cupressaceae*). Spośród wielu jego właściwości, z punktu widzenia przemysłu kosmetycznego na uwagę zasługują przeciwbakteryjne i przeciwgrzybicze^[1,2]. Substancje stosowane w celu uniemożliwienia lub zahamowania rozwoju mikroorganizmów w produkcie nazywane są konserwantami. W Unii Europejskiej spis konserwantów dopuszczonych do użycia znajduje się w załączniku V Rozporządzenia Parlamentu Europejskiego i Rady (WE) nr 1223/2009 z dnia 30 listopada 2009 r. dotyczącego produktów kosmetycznych. Mimo ścisłych regulacji prawnych popularnie stosowane dozwolone substancje konserwujące jak np. parabeny budzą liczne kontrowersje, a konsumenci obawiają się m.in. podrażnień i alergii skórnych, jak również negatywnego wpływu na gospodarkę hormonalną i możliwości zwiększonej częstotliwości występowania nowotworów. Konsumenci również coraz bardziej świadomi są zachodzących zmian klimatycznych i negatywnego wpływu przemysłu jak i części stosowanych obecnie składników kosmetycznych na środowisko, przez to poszukując alternatywy częściej skłaniają się ku kosmetykom bogatym w składniki pochodzenia naturalnego, ekologicznym lub nazywanym “zielonymi”^[3,4]. Coraz szersze zainteresowanie substancjami pochodzenia naturalnego, jako nowymi i bezpieczniejszymi dla konsumentów oraz środowiska składnikami kosmetyków nie ogranicza się jedynie do substancji o właściwościach pielęgnacyjnych ale także przeciwmikrobiologicznych. Jako potencjalny konserwant o pochodzeniu naturalnym zasługuje na uwagę hinokitiol, którego aktywność przeciwbakteryjna i przeciwgrzybicza została potwierdzona szeregiem badań^[5]. Mimo, że dokładny mechanizm oddziaływania tego związku z komórkami bakteryjnymi i grzybiczymi nie jest całkowicie poznany, dotychczasowe badania zaznaczają rolę błony komórkowej i wskazują że obejmuje on hamowanie transportu składników odżywczych i metabolitów poprzez wpływ na oddychanie komórkowe i zmiany przepuszczalności membrany^[6,7].

Przeprowadzone przez nas badania skupiały się na wpływie hinokitiolu na błony komórek bakteryjnych (*E. coli*, *S. aureus*), grzybiczych (*C. albicans*) oraz ludzkiej skóry (fibroblasty, keratynocyty), w celu określenia i porównania wpływu tego związku na poszczególne membrany. Badania prowadzone były z wykorzystaniem modelowych układów lipidowych – monowarstw Langmiura i liposomów, co umożliwiło analizę wpływu hinokitiolu zarówno na układy mieszane (modele membran bakteryjnych, grzybiczych i komórek skóry) jak i na pojedyncze lipidowe składniki. Uzyskane wyniki pozwoliły zauważyć m.in. że błona komórkowa może decydować o selektywności, różnym stopniu toksyczności, hinokitiolu względem różnego typu komórek.

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

[1] A. Ratz-Lyko et al., *Pol J Cosmetol*, 2015, 18, 31 [2] N. El Hachlafi et al., *Processes*, 2021, 9, 1680 [3] R. Testa et al., *J. Glob. Fash. Mark.*, 2024, 15, 357 [4] G.P. Mamta, *Heliyon*, 2025, 11, e41513 [5] Y.-H. Shih et al., *Microbiological Research*, 2013, 5, 254 [6] Y. Morita et. al., *Biocontrol Science*, 2007, 12, 101 [7] N. Komaki, *Biol. Pharm. Bull.*, 2008, 31, 735



S05 KS06

Płynąc z nanokwiatami i nanorurkami węglowymi. O sposobach redukcji lepkości nanofluidów jonowych

Krzysztof Cwynar¹, Anna Kolanowska¹, Sławomir Boncel^{2,3}, Marzena Dzida¹

¹*Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach, Szkolna 9, 40-006 Katowice*

²*Wydział Chemii, Katedra Chemii Organicznej, Bioorganicznej i Biotechnologii, NanoCarbonGroup, Politechnika Śląska, Krzywoustego 4, 44-100 Gliwice*

³*Centrum Elektroniki Organicznej i Nanohybrydowej, Politechnika Śląska, Konarskiego 22B, 44-100 Gliwice*

krzysztof.cwynar@us.edu.pl

Nanofluidy jonowe (INFs) są stabilnymi dyspersjami nanocząstek w cieczy jonowej (ILs). Dodatek długich in-house 16h wielościennych nanorurek węglowych (MWCNTs, 780 μm długość, 60 – 80 nm średnica) do ILs skutkuje znaczącym wzrostem przewodnictwa cieplnego czyniąc takie układy potencjalnymi płynami do transportu ciepła. Niestety, potencjał ten jest istotnie blokowany przez radykalny wzrost lepkości INFs, nawet o rzędy wielkości, z powodu dodatku in-house 16h MWCNTs co wyklucza ich komercyjne zastosowanie. Z tego powodu, kluczowym staje się poszukiwanie sposobów na redukcję lepkości nanofluidów jonowych.

Redukcja lepkości nanofluidów jonowych jest realizowana na dwa niezależne sposoby. Pierwszy sposób polega na dodaniu nanokwiatów WS_2 lub Bi_2S_3 razem z in-house 16h MWCNTs aby uzyskać zredukowaną lepkość INFs. Dodatek 0,50%wag. WS_2 do tiocyjanianu 1-etylo-3-metyloimidazoliowego ([EMIm][SCN]) zawierającego 1,0%wag. in-house 16h MWCNTs skutkuje redukcją lepkości o 16%, w porównaniu do nanofluidu jonowego zawierającego wyłącznie 1,0%wag. inhouse-16h MWCNTs, w 298,15 K, przy szybkości ścinania 100 s^{-1} , jednocześnie zachowując wysoki wzrost przewodnictwa cieplnego o 29%, w odniesieniu do czystej cieczy jonowej, w 298,2 K. Drugi sposób polega na zastosowaniu funkcjonalizowanych MWCNT-COOH (długość < 500 μm , średnica $\approx$ 50 nm, COOH 1,0 $\text{mmol}\cdot\text{g}^{-1}$, OH 0,4 $\text{mmol}\cdot\text{g}^{-1}$) oraz MWCNT-OH (długość 780 μm , średnica 60 – 80 nm, OH 3,0 $\text{mmol}\cdot\text{g}^{-1}$) i zdyspergowaniu ich w [EMIm][SCN] otrzymując hybrydowe nanofluidy jonowe (hINFs). [EMIm][SCN] + 1,5%wag. MWCNT-COOH + 1,5%wag. MWCNT-OH posiada lepkość zwiększoną jedynie o 86%, w porównaniu do czystej cieczy jonowej, w 298,15 K, przy szybkości ścinania 100 s^{-1} , jednocześnie zachowując wysoki wzrost przewodnictwa cieplnego o 66%, w porównaniu do czystej cieczy jonowej, w 298,2 K

Lepkość nanofluidów jonowych może być efektywnie zredukowana przez dodatek nanokwiatów do nanofluidów jonowych zawierających in-house 16h MWCNTs lub przez funkcjonalizację in-house 16h MWCNTs, co przeciera szlak do potencjalnej komercjalizacji nanofluidów jonowych.



Sesja posterowa



S05 PS01

Wpływ budowy kationu na termodynamikę solwatacji w cieczach jonowych na podstawie współczynników aktywności w rozcieńczeniu nieskończenie wielkim

Marta Królikowska, Kamil Paduszyński

*Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny
Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
marta.krolikowska@pw.edu.pl*

Ciecze jonowe należą do grupy rozpuszczalników, których właściwości można precyzyjnie kształtować poprzez odpowiedni dobór budowy kationu i anionu. Poznanie zależności pomiędzy strukturą cieczy jonowej a oddziaływaniami z rozpuszczanymi związkami ma kluczowe znaczenie dla projektowania nowych mediów stosowanych w procesach ekstrakcji, rozdzielania mieszanin oraz magazynowania energii.

W pracy przedstawiono wyniki badań termodynamiki solwatacji w wybranych cieczach jonowych wyznaczone na podstawie współczynników aktywności przy rozcieńczeniu nieskończenie wielkim (IDAC), oznaczonych metodą chromatograficzną. Badania przeprowadzono dla szerokiej grupy związków o zróżnicowanej budowie chemicznej i polarności w funkcji temperatury, co umożliwiło wyznaczenie funkcji termodynamicznych oddziaływań, ocenę wpływu budowy kationu na właściwości solwatacyjne cieczy jonowych oraz wyznaczenie selektywności rozdziału wybranych klas związków. Dane eksperymentalne interpretowano z wykorzystaniem zależności liniowej energii solwatacji (LSER), teorii roztworów regularnych oraz modelu COSMO-RS.

Wykazano, że o procesie solwatacji decydują przede wszystkim oddziaływania elektrostatyczne oraz wiązania wodorowe kontrolowane przez anion cieczy jonowej. Wyznaczone współczynniki aktywności przy rozcieńczeniu nieskończenie wielkim pozwoliły również określić selektywność rozdziału różnych grup związków, wskazując najbardziej perspektywiczne ciecze jonowe do procesów ekstrakcji i separacji. Uzyskane wyniki dostarczają cennych informacji na temat zależności struktura–właściwości–selektywność, stanowiąc podstawę do racjonalnego projektowania nowych cieczy jonowych do zastosowań separacyjnych.

Literatura:

1. Paduszyński, K., Królikowska, M., Chłopek, K., J. Mol. Liq. 457 (2026) 129677.
2. Paduszyński, K., Królikowska, M., J. Phys. Chem. B. 130 (2026) 5953–5970.



S05 PS02

Dopasowanie molekularne w praktyce: Równowagi fazowe w układach soli amfifilowych z bolaamfifilami

Marek Królikowski, Mikołaj Więckowski, Mateusz Łubiński, Michał Fedorowicz

*Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Fizycznej
ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
marek.krolikowski@pw.edu.pl*

Zrozumienie zależności pomiędzy strukturą cząsteczek a ich zachowaniem w mieszaninach jest kluczowe dla chemii supramolekularnej i inżynierii krystalicznej. Zjawisko przestrzennego i chemicznego „dopasowania molekularnego” (ang. molecular complementarity) bezpośrednio wpływa na sieć oddziaływań międzycząsteczkowych, a w konsekwencji na właściwości makroskopowe całego układu.

Celem prezentowanych badań była analiza równowag fazowych ciało stałe–ciecz (SLE) w układach dwuskładnikowych, bazujących na oddziaływaniach pomiędzy amfifilowymi solami a kowalencyjnymi bolaamfifilami (amfifilami zawierającymi grupy polarne w pozycjach α i ω). Jako składniki jonowe wykorzystano sole alkilopirydyniowe: $[\text{Py-C}_{12}][\text{Cl}]$, $[\text{Py-C}_{12}][\text{Br}]$, $[\text{Py-C}_{16}][\text{Cl}]$ oraz $[\text{Py-C}_{12}][\text{BF}_4]$. W roli niejonowych bolaamfifili przebadano α,ω -alkanodiol (oktano-1,8-diol, dekan-1,10-diol) oraz kwas oktano-1,8-diowy.

Systematyczny dobór składników pozwolił na ocenę czynników sterujących termodynamiką i zachowaniem fazowym układów:

- wpływu długości łańcucha alifatycznego kationu (C_{12} vs C_{16}), oraz długość łącznika alifatycznego symetrycznych amfifili (C_8 vs C_{10}),
- wpływu rozmiaru i zdolności koordynacyjnych anionu (od małych, silnie oddziałujących halogenków, po większy, słabiej koordynujący anion tetrafluoroboranowy).
- charakteru grup polarnych – zestawienie dioli z kwasem dikarboksylowym (przy zachowaniu tej samej długości mostka węglowodorowego) obrazuje, jak zmiana polarności i kwasowości grup krańcowych ($-\text{OH}$ vs $-\text{COOH}$) wpływa na sieć wiązań wodorowych

Uzyskane diagramy fazowe pozwoliły zidentyfikować układy, w których dochodzi do tworzenia nowych, stabilnych faz stałych (kokryształów), jak również te charakteryzujące się prostym zachowaniem eutektycznym. Zaprezentowane wyniki stanowią istotny krok w stronę racjonalnego projektowania nowych materiałów funkcjonalnych i układów supramolekularnych o ściśle zdefiniowanych właściwościach

W kontekście aplikacyjnym, wyznaczone zależności stanowią cenne narzędzie modelowe dla świadomej inżynierii krystalicznej (np. przy projektowaniu kokryształów farmaceutycznych) oraz kontrolowanego modyfikowania struktur materiałów organicznych pod kątem właściwości elektrochemicznych. Zdolność do precyzyjnego obniżania lub podwyższania temperatury topnienia poprzez efekt dopasowania molekularnego otwiera drogę do projektowania nowych materiałów zmiennofazowych (PCM – ang. Phase Change Materials) do magazynowania energii termicznej, optymalizacji parametrów niskotemperaturowych cieczy jonowych oraz tworzenia funkcjonalnych eutektyków o pożądanym właściwościach transportowych i strukturalnych.

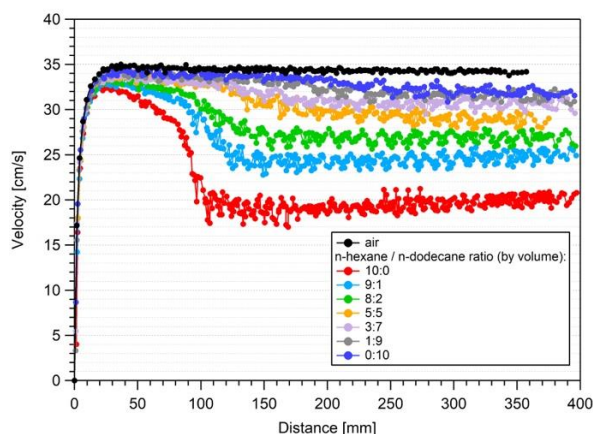
Wpływ mieszanin par organicznych na dynamiczne właściwości granicy faz i hydrodynamikę wznoszących się pęcherzyków

Dominik Kosior, Agata Wiertel-Pochopień, Georgi Gochev, Łukasz Witkowski, Jan Zawala

*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk;
ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków;
dominik.kosior@ikifp.edu.pl*

Lotne związki organiczne nierozpuszczalne w wodzie, które obecne są w fazie gazowej mogą znacząco zmieniać właściwości fizykochemiczne granicy faz ciecz/gaz wpływając na transport masy i hydrodynamikę poruszających się obiektów płynnych w cieczy. W niniejszej pracy zbadano wpływ mieszanin par heksanu i dodekanu na właściwości dynamicznej warstwy adsorpcyjnej tworzącej się na powierzchni unoszących się pojedynczych pęcherzyków powietrza w roztworze kationowego surfaktantu.

Badania przeprowadzono w specjalnie skonstruowanym układzie eksperymentalnym, pozwalającym na generację pojedynczych pęcherzyków w roztworach surfaktantów, przy jednoczesnym wysyceniu objętości pęcherzyków różnymi proporcjami heksanu i dodekanu w fazie gazowej. Po generacji pęcherzyka w roztworze bromku heksadecylo-trimetylu ammoniowego (CTAB) jego ruch monitorowany był za pomocą szybkiej kamery cyfrowej (100 Hz), co umożliwiło wyznaczenie parametrów ruchu pęcherzyków metodą analizy obrazu. Dane dotyczące prędkości pęcherzyków w funkcji odległości od punktu ich generacji w roztworze CTABu o stężeniu 1×10^{-6} mol/dm³ przedstawiono na poniższym rysunku.



Wykazano, że zmiana składu mieszaniny par organicznych prowadzi do istotnych zmian prędkości wznoszenia pęcherzyków, pomimo niezmiennego składu fazy ciekłej. Otrzymane wyniki wskazują, że pary organiczne zmieniają właściwości granicy faz poprzez modyfikację stopnia pokrycia powierzchni pęcherzyka cząsteczkami organicznymi, co wpływa na adsorpcję surfaktantu oraz kinetykę tworzenia dynamicznej warstwy adsorpcyjnej, definiującej stopień oporu hydrodynamicznego.

Kluczową nowością przedstawionej pracy jest wykazanie, że właściwości międzyfazowe oraz hydrodynamika pęcherzyków mogą być precyzyjnie kontrolowane wyłącznie poprzez zmianę składu fazy gazowej, bez jakiegokolwiek modyfikacji składu roztworu. Wyniki te stanowią podstawę nowej koncepcji inżynierii właściwości międzyfazowych poprzez kontrolę składu fazy gazowej (gas-phase engineering of interfacial properties), oferując alternatywę dla klasycznego podejścia opartego na zmianie składu fazy ciekłej.

Wyniki uzyskano w ramach projektu NCN OPUS nr 2025/59/B/ST8/00175



S05 PS04

Wpływ pola magnetycznego na właściwości powierzchniowe surfaktantów

Błażej Podlesny, Ewelina Jarek, Piotr Warszyński

*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk
ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków, Polska
blazej.podlesny@ikifp.edu.pl*

Związki powierzchniowo czynne (surfaktanty) są jednym z najważniejszych produktów chemicznych, szeroko studiowanych zarówno w ramach badań naukowych jak i stosowanych w życiu codziennym oraz przemyśle. Wspólną cechą wszystkich surfaktantów jest charakterystyczny sposób budowy, w którym można wyróżnić część hydrofilową (polarną) oraz część hydrofobową (niepolarną). Tak więc, zaklasyfikowanie związku jako surfaktant nie jest związane z obecnością konkretnej grupy funkcyjnej, przez co w tej klasie znajdują się cząsteczki chemiczne o bardzo zróżnicowanej budowie, a możliwości modyfikacji struktury wydają się być wręcz nieograniczone. Ostatnimi laty, szczególną uwagę badaczy przyciągają surfaktanty magnetyczne, posiadające w swojej strukturze ugrupowanie o właściwościach magnetycznych, za co najczęściej odpowiedzialne są jony metali pierwiastków grup przejściowych lub lantanowców. Poprzez obecność wspomnianego ugrupowania, surfaktanty magnetyczne wykazują zdolność do zmiany swoich właściwości pod wpływem pola magnetycznego [1].

Użyteczność surfaktantów magnetycznych jest nieustannie szeroko eksplorowana. Jak do tej pory, znalazły one zastosowanie między innymi w metodach oczyszczania wody, katalizie, jak również w technikach separacyjnych biomolekuł, takich jak białka [2]. Pomimo wielu prac aplikacyjnych, sposób zachowania się surfaktantów w polu magnetycznym nie został jeszcze jednoznacznie opisany. Szczególnie interesującym i wciąż nierozwiązanym zagadnieniem jest wpływ jednorodnego pola magnetycznego na właściwości wspomnianych związków [3].

W niniejszej pracy podjęliśmy próbę określenia wpływu jednorodnego pola magnetycznego na właściwości fizykochemiczne (napięcie powierzchniowe) surfaktantów oraz na stabilność przygotowanych z nich emulsji. Jako modele badawcze zostały użyte tradycyjne surfaktanty oraz ich magnetyczne pochodne. Przeprowadzone badania miały również za zadanie dostarczyć wiedzy na temat tego, czy w środowisku wodnym, do uzyskania konkretnej odpowiedzi pod wpływem pola magnetycznego, potrzebny jest magnetyczny surfaktant czy wystarczy jedynie jego niemagnetyczny prekursor w obecności paramagnetycznego elektrolitu.

Podziękowania: Projekt został sfinansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki (grant nr. 2022/45/B/ST4/01184 (OPUS 23)).

- [1] A. Mansoor, et al., *ACS Symposium Series*. **2023**, 1447, 1–16
- [2] F. Shehzad, et al., *Adv. Colloid Interface Sci.* **2021**, 293, 102441
- [3] D.M. Reed, et al., *Langmuir*. **2020**, 36 (34), 10074–10081



S05 PS05

Czy stereochemia szkieletu glicerolowego ma znaczenie? Ocena analogu lipidu archeonowego za pomocą monowarstw Langmuira i dynamiki molekularnej.

Vladislav Maliugin, Jan Kobierski, Anita Wnętrzak, Anna Chachaj-Brekiesz, Patrycja Dynarowicz-Łątka, Guilherme Nunez Jaroque.

*Uniwersytet Jagielloński w Krakowie;
Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, D0-15;
vladislav.maliugin@doctoral.uj.edu.pl*

Błony archeonów wyróżniają się obecnością rozgałęzionych łańcuchów izoprenoidowych połączonych wiązaniami eterowymi oraz szkieletem sn-glicero-1-fosforanowym (G1P) o konfiguracji S. Jednakże lipidy eterowe G1P są trudno dostępne w ilościach niezbędnych do badań fizykochemicznych, dlatego w modelach eksperymentalnych stosuje się często łatwiej dostępne analogi G3P o konfiguracji R. Wciąż jednak nie zostało zbadane, w jakim stopniu odwrócenie stereochemii szkieletu glicerolowego wpływa na organizację błony na granicy faz.

W niniejszej pracy oceniamy przydatność komercyjnie dostępnej 1,2-di-O-fytanylo-sn-glicero-3-fosfocholiny (G3PC; 4ME 16:0 diether PC) jako modelu jej naturalnego odpowiednika występującego w błonach archeonów G1P(S), czyli 2,3-di-O-fytanylo-sn-glicero-1-fosfocholiny (G1PC). Monowarstwy G3PC scharakteryzowano eksperymentalnie na granicy faz powietrze–woda z wykorzystaniem techniki Langmuira. Analiza obejmowała izotermy ciśnienia powierzchniowego w funkcji powierzchni przypadającej na cząsteczkę, zależność modułu ściśliwości od ciśnienia powierzchniowego, wpływ temperatury i siły jonowej subfazy na charakterystykę izoterm oraz analizę stabilności monowarstw w różnych warunkach ciśnienia i temperatury.

Następnie przeprowadzono symulacje dynamiki molekularnej stereoizomerów G3PC i G1PC w warunkach odpowiadających eksperymentom. Skoncentrowaliśmy się na uwodnieniu obszaru międzyfazowego, kącie nachylenia lipidów, rozkładach kątów dwuściennych szkieletu glicerolowego oraz parametrach uporządkowania wiązań C–H w łańcuchach fytanylowych. Dodatkowo wyznaczyliśmy pole powierzchni przypadające na cząsteczkę lipidu, grubość monowarstwy oraz wiązania wodorowe, co umożliwiło powiązanie organizacji molekularnej z obserwowanym eksperymentalnie sposobem upakowania.

Połączone podejście eksperymentalne i obliczeniowe pozwala określić, które właściwości układu są zachowane pomimo różnicy stereochemicznej między G1P i G3P, a które są wrażliwe na chiralność. Wyniki dostarczają zatem molekularnych podstaw do oceny, w jakich warunkach komercyjnie dostępna G3PC może być stosowany jako praktyczny fizyczny model błon archeonowych zawierających G1PC.



S05 PS06

Uwalnianie azotu z funkcjonalizowanych nawozów mineralnych

Zuzanna Nowakowska, Elwira Wróblewska, Krzysztof Lubkowski

*Zachodniopomorski Uniwersytet Technologiczny, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Katedra Chemii Organicznej i Chemii Fizycznej
al. Piastów 42, 71-065 Szczecin
elwira.wroblewska@zut.edu.pl*

W pracy przedstawiono wyniki badań procesu uwalniania azotu z wybranych związków chemicznych stanowiących główne składniki nawozów mineralnych, z zastosowaniem folii polimerowych pełniących funkcję barier dyfuzyjnych.

Analizie poddano wpływ rodzaju związku azotowego, rodzaju zastosowanej folii polimerowej oraz jej grubości na przebieg transportu azotu w warunkach laboratoryjnych.

Badania obejmowały azotan(V) amonu oraz wodorofosforan(V) amonu stosowane jako czyste substancje chemiczne. Związki te umieszczano w foliach wykonanych z poli(kwasu mlekowego) oraz polietylenu o zróżnicowanej grubości. Eksperymenty przeprowadzono w środowisku wodnym. Na podstawie zmian stężenia azotu w funkcji czasu wyznaczono stopień uwalniania, szybkość procesu oraz współczynniki dyfuzji.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że funkcjonalizacja badanych związków chemicznych warstwą polimerową istotnie wpływa na proces dyfuzji azotu, prowadząc do obniżenia szybkości jego uwalniania w porównaniu z próbkami niepowlekanymi. Zarówno rodzaj związku chemicznego stanowiącego rdzeń modelowego nawozu mineralnego, jak i rodzaj zastosowanego materiału polimerowego wpływają na kinetykę uwalniania azotu, co znajduje odzwierciedlenie w zróżnicowanych wartościach szybkości uwalniania oraz współczynników dyfuzji.

Zwiększenie grubości warstwy polimerowej powoduje zmniejszenie szybkości uwalniania azotu, co potwierdza możliwość regulowania kinetyki procesu poprzez modyfikację parametrów powłoki.

Dyfuzja azotu przez warstwę polimerową stanowi etap kontrolujący szybkość jego uwalniania z funkcjonalizowanych nawozów mineralnych.

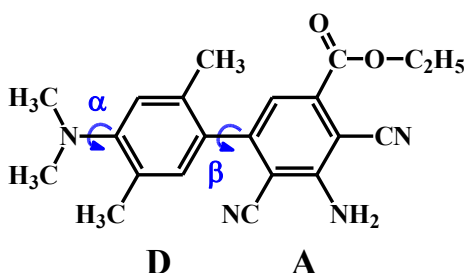
Synteza i właściwości spektroskopowe nowych pochodnych bifenylu – potencjalnych sond spektroskopowych

Marek Pietrzak

Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska,
 Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz. E-mail: marek@pbs.edu.pl

Związki typu donor–akceptor (D–A) stanowią jedną z intensywnie badanych grup materiałów funkcjonalnych stosowanych jako sondy spektroskopowe, sensory chemiczne oraz materiały optoelektroniczne. Szczególne znaczenie mają układy typu donor–akceptor (D–A), w których wzbudzenie elektronowe prowadzi do wewnątrzcząsteczkowego przeniesienia ładunku (ICT). Na właściwości optyczne takich cząsteczek znaczący wpływ mają parametry ich mikrootoczenia.

Celem prezentowanych badań było zaprojektowanie i synteza nowej grupy pochodnych bifenylu o strukturze donor–akceptor oraz określenie wpływu skręcenia cząsteczek na ich właściwości spektroskopowe. Badane cząsteczki zawierają silnie elektronodonorową grupę dimetyloaminową oraz układ elektronoakceptorowych grup cyjanowych. Dodatkowo wprowadzono podstawniki metylowe w wybranych pozycjach pierścienia aromatycznego, wymuszające skręcenie cząsteczki. Umożliwia to kontrolowanie stopnia sprzężenia elektronowego oraz procesów przeniesienia ładunku.



Rys. 1. Wzór strukturalny jednego z badanych związków.

Badane związki otrzymano w dwuetapowej syntezie obejmującej kondensację Knoevenagela oraz reakcję prowadzącą do utworzenia układu bifenylowego. Otrzymano cztery pochodne bifenylu. Strukturę wszystkich produktów potwierdzono metodami spektroskopii NMR oraz IR. Właściwości fotofizyczne otrzymanych barwników zbadano w siedmiu rozpuszczalnikach o zróżnicowanej polarności. Widma absorpcji wykazały jedynie niewielką zależność od właściwości rozpuszczalnika, natomiast widma fluorescencji ujawniły wyraźny efekt solwatochromowy. Otrzymane wyniki wskazują na istotny udział różnych konformerów badanych cząsteczek oraz dużych zmian ich udziału równowagowego pod wpływem polarności środowiska. Analiza zależności Lipperta–Matagi potwierdziła, że wzbudzeniu elektronowemu towarzyszy znaczny wzrost momentu dipolowego cząsteczek oraz zmiana dominujących konformacji w zależności od polarności rozpuszczalnika. Wyniki obliczeń DFT wykazały, że obecność grup metylowych zwiększa skręcenie pierścieni aromatycznych, wpływając na rozkład orbitali HOMO i LUMO oraz intensywność procesu ICT.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że kontrolowana modyfikacja geometrii pochodnych bifenylu stanowi skuteczne narzędzie kształtowania ich właściwości fotofizycznych. Pomimo stosunkowo niskiej wydajności kwantowej fluorescencji otrzymane związki wykazują interesujące właściwości solwatochromowe, co czyni je wartościową platformą do dalszego projektowania nowej generacji sond spektroskopowych.

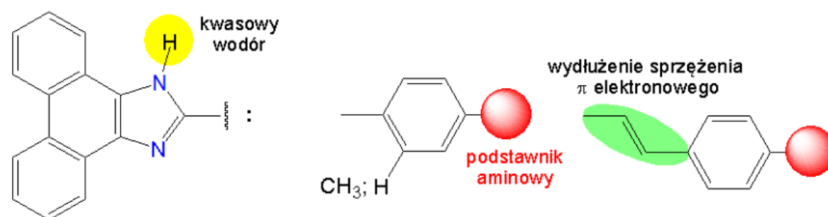
1. M. Pietrzak, Synthesis and spectroscopic study of new biphenyl derivatives as potential spectroscopic probes. *Dyes and Pigments*, 2025, 243, 113073, doi: 10.1016/j.dyepig.2025.113073

Synteza oraz charakterystyka spektroskopowa pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu jako potencjalnych barwników funkcjonalnych

Ilona Pyszka, Beata Jędrzejewska

Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska, Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz. E-mail: beata@pbs.edu.pl

Pochodne fenantro[9,10-d]imidazolu stanowią interesującą grupę π -sprzężonych związków heteroaromatycznych, których właściwości optyczne, elektrochemiczne i termiczne predestynują je do zastosowania jako funkcjonalne materiały organiczne. W szczególności, możliwość modyfikacji struktury rdzenia poprzez wprowadzanie podstawników o zróżnicowanym charakterze elektronowym pozwala na kontrolowanie położenia pasm absorpcji i emisji oraz właściwości związanych z przeniesieniem ładunku. Doniesienia literaturowe wskazują, że pochodne fenantro[9,10-d]imidazolu charakteryzują się wysoką stabilnością termiczną, intensywną luminescencją oraz możliwością dostosowania barwy emisji do wymagań określonych zastosowań optoelektronicznych [1,2]. Wykazano również, że odpowiednia funkcjonalizacja układu π -sprzężonego może prowadzić do znacznego przesunięcia batochromowego oraz modyfikacji wydajności fotoluminescencji, co czyni tę klasę związków interesującą z punktu widzenia projektowania barwników funkcjonalnych [3,4].



Rys. 1. Strategia modyfikacji strukturalnej rdzenia fenantro[9,10-d]imidazolu.

Celem pracy była synteza serii pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu zawierających zróżnicowane podstawniki aminowe oraz wydłużony układ π -elektronowy, a także określenie wpływu ich budowy chemicznej na właściwości spektroskopowe. Syntezę przeprowadzono metodą kondensacji 9,10-fenantrenchinonu z odpowiednimi aldehydami aromatycznymi. Strukturę produktów potwierdzono za pomocą spektroskopii FT-IR oraz ^1H i ^{13}C NMR.

Właściwości optyczne zsyntetyzowanych związków badano metodami spektroskopii absorpcyjnej i fluorescencyjnej. Analiza widm wykazała, że rodzaj i położenie podstawników istotnie wpływają na położenie pasm absorpcji i emisji oraz intensywność luminescencji. Zaobserwowano batochromowe przesunięcie maksimów absorpcji i emisji związane ze zwiększeniem delokalizacji elektronów π . Badania w rozpuszczalnikach o różnej polarności wskazały również na występowanie efektów solwatochromowych, charakterystycznych dla układów wykazujących wewnątrzcząsteczkowy transfer ładunku (ICT).

Wyniki wskazują, że odpowiednia modyfikacja struktury molekularnej pozwala na kształtowanie właściwości fotofizycznych pochodnych fenantro[9,10-d]imidazolu, co czyni je perspektywicznymi materiałami funkcjonalnymi do zastosowań w optoelektronice, fotonice i chemii analitycznej.

1. S. Kula, A. Krawiec, J. Lingagouder, A. Szlapa-Kula, et al., *J. Mater. Chem. C* 2026, 14, 11570.
2. S. Kula, P. Krawczyk, M. Filapek, A. M. Maroń, *J. Lumin.* 2021, 233, 117910.
3. G. G. Dias, M. O. Rodrigues, E. R. S. Paz, M. P. Nunes, et al., *ACS Sensors* 2022, 7, 2865–2919.
4. S. Kula, P. Kalarus, Ł. Kaźmierski, A. Biernasiuk, P. Krawczyk, *Molecules* 2024, 29, 4703.

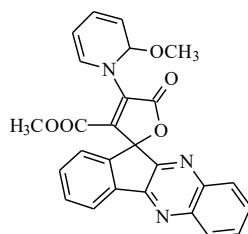
Nowy spirolakton jako fotoinicjator typu II do polimeryzacji rodnikowej inicjowanej światłem widzialnym

Ilona Pyszka, Beata Jędrzejewska

*Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska im. J. J. Śniadeckich;
 e-mail: Ilona.Pyszka@pbs.edu.pl*

Fotopolimeryzacja światłem widzialnym znajduje szerokie zastosowanie w technologii materiałów polimerowych, zwłaszcza w kompozytach stomatologicznych, powłokach ochronnych oraz technologiach addytywnych. W większości komercyjnych materiałów światłoutwardzalnych funkcję fotoinicjatora pełni kamforochinon (CQ), który pomimo wysokiej skuteczności wykazuje jednak istotne ograniczenia, takie jak intensywna żółta barwa, ograniczona absorpcja promieniowania widzialnego oraz niewystarczająca efektywność w niektórych układach fotopolimeryzujących. Z tego względu poszukiwanie nowych związków absorbujących promieniowanie w zakresie światła widzialnego i zdolnych do efektywnego inicjowania polimeryzacji pozostaje aktualnym kierunkiem badań [1-3].

W prezentowanej pracy przedstawiono wyniki badań nad nowym związkiem z grupy spirolaktonów zaprojektowanym do zastosowań jako fotoinicjator typu II. Otrzymany związek został zsyntetyzowany i scharakteryzowany z wykorzystaniem metod spektroskopowych (^1H NMR, ^{13}C NMR, FT-IR oraz UV-Vis), a następnie oceniono jego właściwości fotofizyczne oraz zdolność do inicjowania polimeryzacji rodnikowej w obecności różnych koinicjatorów. Przeprowadzono również badania kinetyki fotopolimeryzacji z uwzględnieniem wpływu stężenia fotoinicjatora, rodzaju koinicjatora, natężenia promieniowania oraz struktury zastosowanego monomeru.



Rys. 1. Struktura zsyntezowanego spirolaktonu.

Uzyskane wyniki wykazały, że badany spirolakton charakteryzuje się korzystnymi właściwościami absorpcyjnymi w zakresie światła widzialnego oraz wysoką aktywnością fotoinicjującą. Największą efektywność inicjowania procesu uzyskano dla układów zawierających koinicjatory siarkowe, natomiast porównanie z kamforochinonem wykazało wysoką aktywność badanego spirolaktonu, który zapewniał efektywne inicjowanie polimeryzacji przy wielokrotnie niższym stężeniu.

Otrzymane wyniki potwierdzają, że spirolaktony stanowią obiecującą grupę związków do projektowania nowoczesnych systemów fotoinicjujących przeznaczonych do materiałów światłoutwardzalnych i mogą stanowić interesującą alternatywę dla klasycznych fotoinicjatorów stosowanych obecnie w technologii polimerów.

1. I. Pyszka, Z. Kucybała, J. Pączkowski, *Macromol. Chem. Phys.* 2004; 205, 1
2. W.A. Green, *Industrial Photoinitiators. A Technical Guide*. CRC Press, 2010.
3. A. Kowalska, J. Sokołowski, K. Bociong, *Polymers* 2021, 13, 470



S05 PS10

Wpływ temperatury i ciśnienia na kinetykę fotochemicznego i termicznego rozkładu inicjatorów rodnikowych

Ewa Sikora, Karolina Adrjanowicz

Uniwersytet Śląski w Katowicach

Ewa.Sikora@us.edu.pl

2,2'-Azobis(izobutyronitryl) (AIBN) należy do najczęściej stosowanych inicjatorów polimeryzacji rodnikowej. Kinetyka jego rozkładu pod podwyższonym ciśnieniem została dotychczas scharakteryzowana głównie w niepolarnych i słabo polarnych rozpuszczalnikach organicznych, brakuje natomiast systematycznych badań dotyczących rozpuszczalników polarnych. Zagadnienie to może mieć znaczenie praktyczne, ponieważ niektóre polarne monomery, takie jak N-winylopirolidon, są polimeryzowane rodnikowo w masie z wykorzystaniem AIBN. Właściwości polarnego środowiska monomeru oraz podwyższone ciśnienie mogą wpływać na szybkość rozkładu inicjatora, a w konsekwencji również na przebieg całego procesu polimeryzacji.

Celem prowadzonych badań jest określenie wpływu ciśnienia oraz właściwości rozpuszczalnika na kinetykę termicznego i fotochemicznego rozkładu AIBN, ze szczególnym uwzględnieniem rozpuszczalników polarnych. Kinetykę procesu badano metodami *ex situ* spektroskopii UV-Vis oraz ^1H NMR, monitorując zmiany stężenia AIBN w funkcji czasu w warunkach ciśnienia atmosferycznego i podwyższonego. W pomiarach UV-Vis rejestrowano zmiany absorbancji pasma charakterystycznego dla AIBN, natomiast spektroskopię ^1H NMR wykorzystano również do identyfikacji produktów jego rozkładu. Badania eksperymentalne uzupełniono symulacjami dynamiki molekularnej, umożliwiającymi analizę lokalnego otoczenia cząsteczek AIBN, ich solwatacji oraz oddziaływań z cząsteczkami rozpuszczalnika.

Synteza i charakterystyka spektroskopowa chiralnych trikarbonylkowych kompleksów Re(I) z pochodną chinolino-2-karboksyamidu

D. Addisu Kure,¹ K. Łyczko,^{1*}, R. Kawęcki,² E. Bednarek,³ J. E. Rode,^{1*}, J. Cz. Dobrowolski^{1,3*}

¹*Institute of Nuclear Chemistry and Technology, 16 Dorodna Street, 03-195 Warsaw*

²*Faculty of Science, Siedlce University, 3 Maja Street No 54, 08-110 Siedlce*

³*National Medicines Institute, Chełmska 30/34, 00-725 Warsaw*

e-mail: d.kure@ichtj.waw.pl

Chiral metallodrugs are rare, even though enantiomers and their interactions with other chiral entities may give rise to distinct physiological and/or toxicological responses. Here, we report studies on tricarbonyl rhenium(I) complexes, as they have been shown to exhibit good antimicrobial and anticancer activity.¹⁻³ We synthesized a series of novel optically active Re(I) complexes with chiral QL_{NO} ligand (Fig. 1a) in the '2+1' system, and for each enantiomer we isolated pure diastereoisomers by selective crystallization. Formation of diastereoisomers is due to the ability of the unsymmetrical bidentate ligand to coordinate to the Re(CO)₃ core in two distinct orientations, thereby making the metal atom a second chiral center. The configuration at the metal center was confirmed by single-crystal X-ray diffraction (scXRD) (Fig. 1b), yet this issue remains problematic for non-crystallizing systems. To address this, electronic circular dichroism (ECD) spectroscopy, supported by DFT calculations, was employed to evaluate the suitability of this approach. The ECD spectra exhibited pronounced differences, allowing distinction between diastereoisomers (Fig. 1c). DFT calculations were conducted for known configurations of both the chiral ligand and the chiral metal center, and for various ligand conformations, as the spectra were measured in DCM solution. Comparison of experimental (Fig. 1c) and calculated ECD spectra (Fig. 1d) enabled assignment of the configuration at the Re center, with results consistent with scXRD data. These findings demonstrate that the ECD method is an effective tool for assigning metal-center configurations in Re(I) complexes.

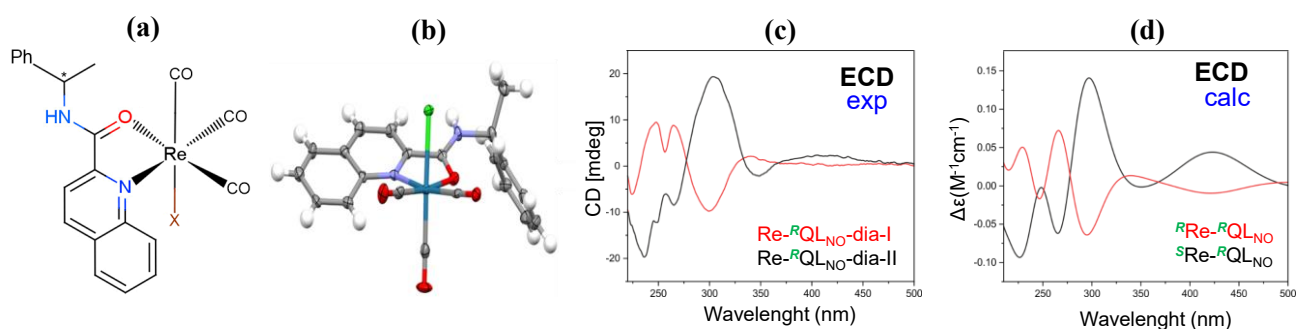


Fig. 1 (a) Schematic structures of synthesized [Re(CO)₃(QLNO)X] complexes (X= Cl⁻, Br⁻). (b) scXRD structure of the [(*S*)-Re(CO)₃(*R*)-QLNO]Cl complex. (c) Experimental (in DCM) and (d) calculated (PBE0/def2TZVP/PCM) ECD spectra of [Re(CO)₃(*R*)-QLNO]Cl diastereoisomers.

This work was supported by the National Science Centre in Poland Grant No. 2022/47/B/NZ7/02765.

1. S. Fulgencio, M. Scaccaglia, A. Frei, ChemBioChem 2024, 25, e202400435
2. Q. Qi, Q. Wang, Y. Li, D. Z. Silva, M. E. L. Ruiz, R. Ouyang, B. Liu, Y. Miao, Molecules 2023, 28, 2733.
3. K. Łyczko, A. Pogorzelska, U. Częścik, M. Koronkiewicz, J. E. Rode, E. Bednarek, R. Kawęcki, K. Węgrzyńska, A. Baraniak, M. Milczarek, Jan Cz. Dobrowolski, RSC Adv., 2024, 14, 18080.

Rozwój strategii wzmacniania właściwości chiroptycznych w funkcjonalnych kompleksach metali

Élise Antonetti, Michał Michałak, Marcin Górecki

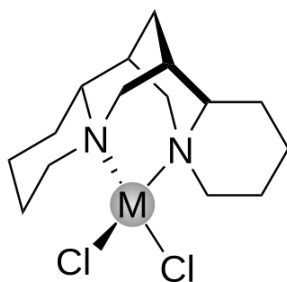
Instytut Chemii Organicznej PAN, Warszawa

elise.antonetti@icho.edu.pl

The rational design of functional chiral materials requires a fundamental understanding of how to control and amplify chiroptical responses. Despite significant progress in this area^[1], this understanding remains limited. It is chiefly due to the fact that chiroptical analysis is often limited to a single spectral range (UV-Vis or IR) and is usually conducted only in solution. Furthermore, although certain classes of compounds, such as chiral open-shell transition-metal complexes (especially Co^{II}), are known to exhibit unusually strong VCD signals associated with low-lying electronic excited states,^[2–4] a systematic comparison of how different transition-metal centers influence these effects is still lacking.

The naturally occurring (–)-sparteine provides robust benchmark ligand for this aim.^[5] The conformational rigidity of the sparteine restricts the complex geometry, allowing us to isolate the impact of the metal on the optical activity. So far, optically pure Co^{II}, Ni^{II} and Zn^{II} sparteine complexes have been studied in solution, in the UV-Vis and IR ranges, to validate measurements and calculation methods.

The present contribution presents our investigation of a new series of (–)-sparteine complexes, including Cu^{II}, Fe^{II}, and Mn^{II} derivatives. By combining comprehensive chiroptical spectroscopy, covering the full NIR-CD spectral range, with quantum chemical calculations, we aim to establish direct relationships between the molecular, electronic, and vibrational structure of these complexes and their observed chiroptical properties. This will provide a better understanding of how the metal center and molecular structure determine chiroptical behavior, enabling the rational design of complexes with tailored chiroptical properties.



M = Co, Ni, Zn, Cu, Mn, Fe

Fig. Structure of the studied complexes.

Work supported by the grant NCN SonataBis n°2024/54/E/ST4/00132.

[1] Lininger, A.; Palermo, G.; Guglielmelli, A.; Nicoletta, G.; Goel, M.; Hinczewski, M.; Strangi, G., *Adv. Mater.* **2023**, 35 (34), 2107325.

[2] Nafie, L. A. J., *Phys. Chem. A* **2004**, 108 (35), 7222–7231.

[3] Pescitelli, G.; Lüdeke, S.; Chamayou, A.-C.; Marolt, M.; Justus, V.; Górecki, M.; Arrico, L.; Di Bari, L.; Islam, M. A.; Gruber, I.; Enamullah, M.; Janiak, C., *Inorg. Chem.* **2018**, 57 (21), 13397–13408.

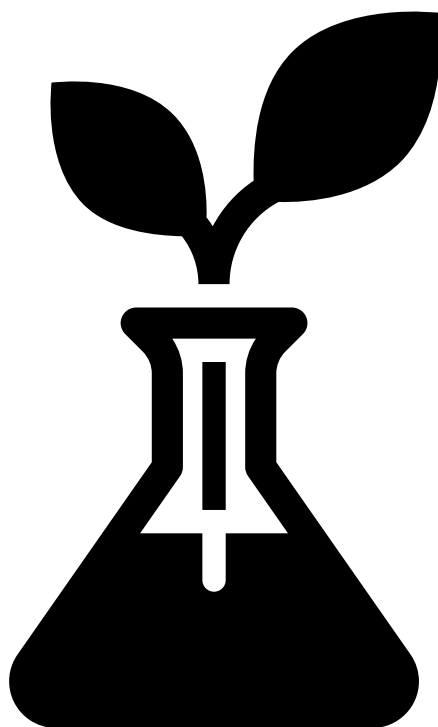
[4] Papi, G.; Guelfi, M.; Bagnasco, A.; Marchetti, F.; Pescitelli, G., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, 64 (52), e17057.

[5] Mason, S. F.; Peacock, R. D., *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1973**, No. 2, 226–228.



S06

Chemia analityczna i zielone technologie





Wykłady sekcyjne



S06 WS01

Zielone technologie w gospodarce komunalnymi osadami ściekowymi

Jolanta Latosińska

*Politechnika Świętokrzyska, Wydział Inżynierii Środowiska, Geodezji i Energetyki Odnawialnej
Al. Tysiąclecia Państwa Polskiego 7, Kielce 25-314
jlatosin@tu.kielce.pl*

Zielone technologie będące jednym z filarów realizacji celów zielonej gospodarki pełnią ważną rolę w eksploatowanych obiektach infrastruktury komunalnej. Nieodłącznym produktem oczyszczania ścieków komunalnych są osady ściekowe. W Polsce, podobnie jak w innych krajach, utrzymuje się trend wzrostowy masy powstających komunalnych osadów ściekowych. Właściwości i ilości osadów ściekowych determinuje stopień urbanizacji, rodzaj i stężenia zanieczyszczeń w ściekach surowych oraz sposób oczyszczania ścieków. Komunalne osady ściekowe wyróżniają się obecnością związków niebezpiecznych. Jednocześnie osady ściekowe zasobne są w substancje korzystne m.in. ze względu na przyrodnicze, w tym rolnicze wykorzystanie. Przedstawiono przegląd, który obejmował rozwiązania z zakresu gospodarki komunalnymi osadami ściekowymi zgodne z zasadami zrównoważonego rozwoju. W analizie uwzględniono podział na technologie stosowane w ciągu technologicznym przeróbki osadów ściekowych oraz na metody końcowego ich zagospodarowania. Szczególny akcent położono na wykorzystanie komunalnych osadów ściekowych w produkcji materiałów budowlanych. Stwierdzono, że pożądane do realizacji celów zrównoważonego rozwoju metody bezodpadowego wykorzystania osadów ściekowych z jednoczesnym ograniczeniem zużycia surowców naturalnych mogą być stosowane w produkcji kruszyw, zapraw i cementu. Ponadto unieruchomienie związków niebezpiecznych w produktach zapobiega wtórnemu zanieczyszczeniu środowiska.



S06 WS02

PFAS w wodach i ściekach: wyzwania analityczne oraz obowiązki wynikające z regulacji europejskich

Joanna Zembrzuska*, Izabela Kruszelnicka**, Łukasz Szupianek**

Politechnika Poznańska, Wydział Technologii Chemicznej, Wydział Inżynierii Środowiska i Energetyki;
61-131 Poznań, ul. Berdychowo 4;
Joanna.Zembrzuska@put.poznan.pl*

Per- i polifluoroalkilowe substancje (PFAS) stanowią jedną z bardziej złożonych grup zanieczyszczeń środowiskowych ze względu na swoją wyjątkową trwałość, mobilność oraz toksyczność. Ich obecność w wodach powierzchniowych, podziemnych i w ściekach komunalnych oraz przemysłowych stwarza istotne ryzyko dla zdrowia ludzi i ekosystemów. W ostatnich latach PFAS stały się kluczowym obszarem zainteresowania badaczy oraz władz europejskich, czego efektem są nowe obowiązki monitoringu i oceny ryzyka w sektorze wodno-ściekowym.

Podczas wykładu zostanie przedstawiony aktualny stan regulacji UE, w tym wymagania Dyrektywy (UE) 2020/2184 dotyczącej jakości wody przeznaczonej do spożycia, która wprowadza obowiązek oznaczania dwóch parametrów: „suma PFAS” oraz „PFAS ogółem”. Omówione również zostaną projektowane środowiskowe normy jakości (EQS) w ramach Ramowej Dyrektywy Wodnej oraz stanowiska Komisji Europejskiej i komitetu SCHEER dotyczące zasadności wprowadzania norm dla „PFAS total”.

Główny nacisk wykładu zostanie skierowany na wyzwania analityczne wynikające z różnorodności PFAS oraz ograniczeń dostępnych metod. Omówione zostaną metody partycypacyjne (LC-MS/MS (zgodnie z EN 17892:2024) oraz metody przybliżone (TOP Assay, EOF-CIC), wraz z ich niepewnościami, podatnością na interferencje matrycowe oraz ryzyko błędnej interpretacji wyników. Przedstawione zostaną również konsekwencje praktyczne dla laboratoriów, wodociągów i oczyszczalni, w tym wymagania dotyczące jakości danych, częstotliwości monitoringu oraz działań naprawczych w przypadku przekroczeń.

W podsumowaniu zostaną wskazane kluczowe kierunki rozwoju w obszarze analityki PFAS, technologii ich usuwania oraz regulacji prawnych, wskazujące na konieczność integracji podejść analitycznych, środowiskowych i legislacyjnych w celu skutecznego ograniczenia obecności PFAS w środowisku wodnym.



S06 WS03

Ocena narażenia populacji na wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne w Krakowie z wykorzystaniem epidemiologii ściekowej

Katarzyna Styszko¹, Laura Węgrzyn¹, Karolina Cwynar¹, Zuzanna Prus¹, Dominika Uchmanowicz¹, Justyna Pyssa¹, Elżbieta Sochacka-Tatara², Agnieszka Pac²

¹Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, Wydział Energetyki i Paliw, al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków

²Uniwersytet Jagielloński - Collegium Medicum, Katedra Epidemiologii i Medycyny Zapobiegawczej, ul. Kopernika 7A, 31-034 Kraków
E-mail: styszko@agh.edu.pl

Wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne (WWA) należą do istotnych zanieczyszczeń środowiska o potwierdzonym działaniu mutagennym, teratogennym i kancerogennym. Ze względu na szybki metabolizm związków macierzystych, użytecznymi biomarkerami narażenia są ich hydroksylowe pochodne (OH-WWA), wydalone głównie z moczem i trafiające do ścieków komunalnych.

Celem pracy była ocena narażenia mieszkańców Krakowa na WWA z zastosowaniem podejścia wastewater-based epidemiology (WBE). Badaniami objęto surowe ścieki z dwóch oczyszczalni: Kraków-Kujawy oraz Kraków-Płaszów, pobierane w postaci 24-godzinnych prób złożonych w dniach 5–18 lutego 2024 r. Oznaczono dwanaście metabolitów OH-WWA, w tym 1- i 2-naftol, fluorenole, fenantrole, 1-hydroksypiren oraz 3-hydroksybenzo[a]piren. Probki po filtracji poddano ekstrakcji do fazy stałej, a oznaczenia wykonano techniką UHPLC-MS/MS. Zastosowana metoda charakteryzowała się dobrą czułością i liniowością ($R^2 > 0,99$), co potwierdziło jej przydatność do oznaczania OH-WWA w ściekach.

Najwyższe stężenie odnotowano dla 1-OH-NAP w oczyszczalni Kujawy (647 ng/L), natomiast najniższe dla 3-OH-BaP w oczyszczalni Płaszów (0,012 ng/L). Dominacja naftoli w fazie wodnej była związana z ich większą rozpuszczalnością, podczas gdy metabolity o większej masie cząsteczkowej wykazywały silniejszą tendencję do sorpcji na fazie stałej. Na podstawie uzyskanych stężeń wykonano obliczenia wsteczne, które wykazały wyraźną zmienność dobową oraz różnice pomiędzy analizowanymi zlewniami. W Kujawach najwyższe oszacowane narażenie dotyczyło fenantrolu, natomiast w Pławowie fluorenołu. Podwyższone poziomy obserwowano w drugiej połowie kampanii pomiarowej, co było zgodne z wyższymi stężeniami PM₁₀ i warunkami charakterystycznymi dla sezonu grzewczego. Uzyskane wyniki potwierdzają, że WBE jest użytecznym, nieinwazyjnym narzędziem do oceny zbiorowego narażenia mieszkańców na WWA oraz do śledzenia krótkoterminowych zmian związanych z jakością powietrza i presją środowiskową. Słowa kluczowe: ścieki, OH-WWA, wielopierścieniowe węglowodory aromatyczne, epidemiologia ściekowa, UHPLC-MS/MS.

Projekt został sfinansowany przez Narodowe Centrum Nauki (grant nr 2022/45/B/ST10/02108). Badania były wspierane przez AGH w ramach programu „Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza”.

Sposoby analitycznego określenia wpływu łuski gryczanej na wartość odżywczą i cechy sensoryczne pieczywa

Joanna Klepacka, Marta Czarnowska-Kujawska

Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie, Wydział Nauki o Żywności,
Katedra Towaroznawstwa i Badań Żywności, Plac Cieszyński 1, 10-719 Olsztyn
e-mail: klepak@uwm.edu.pl

Określenie wartości odżywczej żywności na podstawie jej składu chemicznego jest jedną z najważniejszych i najczęściej określanych cech produktów spożywczych. Główne składniki żywności to: węglowodany, białka, tłuszcze, witaminy i związki mineralne. Zawiera ona również związki wykazujące pozytywny i silny wpływ na organizm człowieka nie należące do żadnej z wymienionych grup, np. składniki fenolowe (w tym flawonoidy), karotenoidy, fitoestrogeny czy probiotyki.

Jednostki kontrolujące żywność sprawdzają w niej poziom wszystkich składników wpływających na jej jakość, zarówno występujących w niej naturalnie, jak i dodawanych na etapie przetwarzania a także przechodzących w drodze jej zanieczyszczenia. Szczegółowy wykaz składników i właściwości produktów spożywczych które należy oznaczyć oraz zalecana częstotliwość badań kontrolnych wskazane są w normach, które w Polsce tworzy przede wszystkim Polski Komitet Normalizacyjny (PKN), a za granicą Międzynarodowa Organizacja Normalizacyjna (ISO), wytyczne te można też znaleźć w różnego rodzaju aktach prawnych.

W czasie prowadzenia badań naukowych ich autorzy samodzielnie określają jakie cechy czy składniki żywności należy oznaczyć, aby jak najlepiej zobrazować istotę i cel prowadzonych badań. W niniejszej pracy proces ten przedstawiono na przykładzie pieczywa wzbogaconego łuską gryczaną a celem badań stało się wskazanie najlepszego sposobu analitycznego określenia jego wartości odżywczej i cech sensorycznych.

Dla wielu konsumentów pieczywo stanowi podstawowy składnik diety i spożywane jest kilka razy dziennie. W związku ze wzrastającą świadomością społeczeństwa wiele osób przy zakupie żywności zwraca uwagę nie tylko na jej smak, cenę czy dostępność, ale również na jej wpływ na zdrowie. Ważnym kryterium wyboru staje się też rodzaj użytych surowców i związany z ich pozyskiwaniem aspekt ekologiczny. Coraz większą popularnością cieszą się też produkty typu *novel food* (nowa żywność), czyli w przypadku Polski i innych krajów UE takie, które nie były w znacznym stopniu spożywane przed 15 maja 1997 roku (w przypadku innych krajów sposób definiowania tej grupy może być różny). Wszystkie z wymienionych czynników wpłynęły na wykorzystanie w niniejszych badaniach łuski gryczanej traktowanej jako funkcjonalny dodatek do pieczywa. Jest ona wytwarzana w dużych ilościach w czasie wytwarzania kaszy gryczanej i mimo jej wysokiej wartości odżywczej związanej przede wszystkim ze znaczną zawartością błonnika, ale również polifenoli i składników mineralnych, wykorzystywana jest głównie do celów niespożywczych (jako np. wypełnienie materacy, ściółka dla zwierząt czy materiał opałowy).

W części eksperymentalnej niniejszej pracy wytworzono w warunkach laboratoryjnych pieczywo pszenne z dodatkiem łuski gryczanej na poziomie 1,5%; 3% i 4,5%, przygotowano też pieczywo kontrolne bez dodatku łuski, a następnie poddano je badaniom z wykorzystaniem różnych metod analitycznych.

W wyniku przeprowadzonych badań wykazano, że najbardziej rozsądne ze względu na koszt, czas i aspekt ekologiczny oraz wiarygodność wykonywanych analiz oraz różnicowanie analizowanych produktów jest określenie wpływu dodawanej łuski gryczanej za pomocą następujących parametrów określających wartość odżywczą pieczywa: zawartości wybranych składników mineralnych, ogólnej zawartości związków fenolowych, zawartości przeciwutleniaczy (z podziałem na rozpuszczalne w wodzie i tłuszczach), poziomu wybranych kwasów fenolowych (np. protokatechowego i synapinowego) i wybranych flawonoidów (np. rutyny i witeksyny). Zawartość związków mineralnych określono techniką spektrometrii absorpcji atomowej (ASA), ogólną zawartość związków fenolowych określono metodą kolorymetryczną (Folina–Ciocalteu), poziom przeciwutleniaczy metodą fotochemiluminescencyjną (PCL) a kwasów fenolowych i flawonoidów techniką wysokosprawnej chromatografii cieczowej sprzężonej ze spektrometrią mas (mikro-HPLC-MS). Cechy sensoryczne określono metodą profilowania różnicowego wykonaną przez 10 osobowy przeszkolony panel sensoryczny, a najlepiej różnicującymi badane próbki parametrami były: smak i zapach (w tym posmak i zapach gryczany), sprężystość i barwa. Warto podkreślić, że zespół przeszkolonych oceniających lepiej zróżnicował barwę analizowanych produktów niż wykorzystany do badań instrumentalny system CIE-lab, w którym najlepiej do założonego celu nadawał się parametr L (jasność).

Wnioskiem z przeprowadzonych badań jest wskazanie potrzeby indywidualnego określenia dla każdej grupy produktów spożywczych najlepszych dla założonego celu badań metod analitycznych, ponieważ przeprowadzanie wszystkich oznaczeń wskazanych w normach jest często nieuzasadnione ekonomicznie i ekologicznie, nie umożliwia też takiego odróżnienia analizowanych produktów jakie mogą umożliwić inne, nieznormalizowane procedury analityczne.



S06 WS05

Biomateriały sorpcyjne w zielonych technologiach usuwania i odzyskiwania pierwiastków

Joanna Kluczka

Politechnika Śląska;

Katedra Chemii Nieorganicznej, Analitycznej i Elektrochemii;

ul. Krzywoustego 6, 44-100 Gliwice;

joanna.kluczka@polsl.pl

Wdrażanie zasad gospodarki o obiegu zamkniętym oraz zaostrzanie norm środowiskowych wymagają opracowania efektywnych i ekologicznych metod oczyszczania wód oraz odzysku surowców. Niniejsze wystąpienie prezentuje potencjał aplikacyjny zaawansowanych biomateriałów sorpcyjnych – opartych głównie na chitozanie, alginianie oraz pektynie – w procesach selektywnej separacji zróżnicowanej grupy pierwiastków. Badania podzielono na trzy kluczowe obszary: ujęcie agro-ekologiczne, obejmujące usuwanie i odzysk fosforu (fosforanów) oraz boru (boranów); aspekt technologiczny, ukierunkowany na odzysk metali krytycznych (galu i niklu); a także inżynierię środowiska, skupioną na eliminacji substancji wysoko toksycznych (rtęci i ołowiu).

W ramach badań zsyntezowano oraz scharakteryzowano innowacyjne, hybrydowe i chemicznie modyfikowane biopolimery, uformowane w struktury hydrożelowe. W celu wyjaśnienia relacji struktura–właściwości, materiały poddano szczegółowej analizie fizykochemicznej zarówno przed, jak i po procesie sorpcji.

Procesy sorpcyjne realizowano w układach okresowych (statycznych) oraz dynamicznych (kolumnowych), co pozwoliło na ocenę potencjału aplikacyjnego hydrożeli w warunkach zbliżonych do rzeczywistych operacji przemysłowych. Równowagę oraz dynamikę procesów opisano za pomocą matematycznego modelowania izoterm (m.in. Langmuira, Freundlicha) i kinetyki sorpcji (pseudo-pierwszorzędowego i pseudo-drugorzędowego), co umożliwiło precyzyjne określenie maksymalnych pojemności sorpcyjnych oraz mechanizmów wiązania sorbatów.

W pracy poświęcono również uwagę zrównoważonemu zarządzaniu cyklem życia sorbentów. Zaprezentowano efektywne protokoły desorpcji umożliwiające zatężenie i odzysk cennych pierwiastków (np. galu w obecności jonów glinu czy boru), a także koncepcje utylizacji i bezpiecznego zagospodarowania zużytych biomateriałów (m.in. w kontekście recyklingu fosforu z odcieków). Udowodniono, że hydrożele biopolimerowe stanowią realną, „zieloną” alternatywę dla komercyjnych, syntetycznych żywic jonowymiennych.

Podziękowanie: część badań i opłatę konferencyjną sfinansowano z grantów PŚ: 04/010/BK26/1120 i 04/010/SDU/10-21-06.



S06 WS06

Zużyte tekstylia - uciążliwy odpad czy surowiec dla zrównoważonej energetyki i przemysłu chemicznego?

Izabela A. Witońska, Michał J. Binczarski, Justyna Z. Żuberek, Aleksandra Pawlaczyk, Małgorzata I. Szynkowska-Jóźwik

*Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej
90-543 Łódź, ul. Żeromskiego 114
e-mail: izabela.witonska@p.lodz.pl*

Rynek tekstylny stale się rozwija, próbując dostosować się do nowych trendów nie tylko w modzie, ale również segmencie tkanin użytkowych i technicznych. W praktyce przemysłowej włókna naturalne (bawełna, wełna, len, itd.) są często mieszane z włóknami syntetycznymi (np. poliamidami, poliestrami, itd.) w celu uzyskania materiałów o ulepszonych właściwościach funkcjonalnych. Ponadto, aby nadać tekstyliom określone cechy wizualne lub użytkowe, poddaje się je modyfikacji chemicznej poprzez barwienie, nakładanie środków hydrofobowych, środków zmniejszających palność, stabilizatorów UV, związków przeciwdrobnoustrojowych lub owadobójczych, a także żywic zapewniających tzw. „trwałe prasowanie”. Chociaż takie zabiegi poprawiają właściwości użytkowe tekstyliów, to jednocześnie znacznie utrudniają ich naturalną biodegradację. Obecnie w Afryce (Kenia, Angola, Tunezja, Ghana, Tanzania, Uganda) i Azji Południowej (Pakistan, Indie) powstają ogromne wysypiska używanej odzieży, gdzie jest ona nie tylko składowana, ale również spalana, a nawet wyrzucana do oceanu, powodując katastrofy ekologiczne. W związku z tym na całym świecie (USA, UE, Wielka Brytania) wprowadzane są różnego rodzaju regulacje prawne, mające na celu wypracowanie skutecznych metod recyklingu odpadów tekstylnych i stworzenia zrównoważonej gospodarki w tym sektorze.

W wystąpieniu przedstawiona zostanie metoda wstępnej obróbki odpadów tekstylnych na bazie włókien naturalnych (bawełny i wełny) domieszkowanych włóknami syntetycznymi (poliamidami i poliestrami) za pomocą kwasów mineralnych oraz dalsza biologiczna konwersja otrzymanych hydrolizatów w biogaz i etanol. Przedstawione zostaną wyniki badań składu hydrolizatów (HPLC, GC-MS, ICP-OES) oraz analiza wyników badań składu stałych pozostałości po hydrolizie (FTIR, spektroskopia Ramana, SEM, XRD). Na podstawie uzyskanych wyników stwierdzono, że hydrolizaty przędzy bawełnianej z dodatkami syntetycznymi zawierają pulę cukrów, w tym glukozy, niezbędną do produkcji biogazu przez mikroorganizmy z osadu czynnego z oczyszczalni ścieków w Zduńskiej Woli, natomiast nie zawierają inhibitorów fermentacji. Dodatek hydrolizatu wełny w ilości do 5% v/v, poprawia wydajność biogazu. Procesy biologiczne wykonano w warunkach laboratoryjnych, w bioreaktorach o pojemności 1L [1] oraz 10 L. Ponadto stwierdzono, że hydrolizaty tekstyliów bawełnianych, w tym wybarwionych przędz mieszanych, mogą być wykorzystane również w fermentacji etanolowej z udziałem wybranych szczepów drożdży, a uzyskany w tych procesach etanol można dalej przekształcać w wyższe alkohole w procesach katalitycznego sprzęgania [2]. Przedstawiona metoda chemiczno-biologicznego przekształcania tekstyliów zawierających bawełnę nie wymaga wstępnego rozdzielania włókien naturalnych od syntetycznych i po wykonaniu dalszych badań w powiększonej skali oraz optymalizacji parametrów procesowych może być wykorzystywana do przekształcania odpadów włókienniczych w wartościowe produkty chemiczne i energetyczne.

[1] M. J. Binczarski i współpr., *Renewable Energy*, **227**, 2024, 120428, <https://doi.org/10.1016/j.renene.2024.120428>

[2] J. Z. Zuberek i współpr., *Industrial Crops and Products*, **240**, 2026, 122673, <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2026.122673>



S06 WS07

Od struktury matrycy polimerowej do decyzji formulacyjnej: zintegrowana analityka w projektowaniu nanonośników karwedilolu do terapii nadciśnienia

Ewa Olędzka¹, Adam Kasiński¹, Katarzyna Strzelecka^{1,2}, Joachim Frankowski^{1,2}, Matylda Kurzątkowska^{1,2}, Ada Stankiewicz¹, Sylwester Krukowski¹, Marcin Sobczak¹

¹Katedra Chemii Farmaceutycznej i Biomateriałów, Wydział Farmaceutyczny, Warszawski Uniwersytet Medyczny, ul. Banacha 1, 02-097 Warszawa

²Szkoła Doktorska, Warszawski Uniwersytet Medyczny, ul. Żwirki i Wigury 81, 02-093 Warszawa
e-mail eoledzka@wum.edu.pl

Nadciśnienie tętnicze pozostaje istotnym problemem zdrowia publicznego a skuteczność jego farmakoterapii może ograniczać zarówno niska biodostępność leku jak i niedostosowanie drogi podania do potrzeb wybranej grupy pacjentów. Karwedilol, nieselektywny β - i α_1 -adrenolityk, charakteryzuje się słabą rozpuszczalnością w wodzie oraz intensywnym metabolizmem pierwszego przejścia. Celem projektu jest opracowanie biodegradowalnych nanonośników karwedilolu jako komponentów termowrażliwej formulacji doodbytniczej. Przyjęto, że powiązanie mikrostruktury, topologii i właściwości fizykochemicznych matrycy polimerowej z parametrami nanocząstek, a następnie z zachowaniem finalnej postaci leku, umożliwi analitycznie sterowane projektowanie systemu.

Otrzymano bibliotekę czteroramiennych poliestrów o rdzeniu pentaerytrytolowym i zróżnicowanej budowie chemicznej. Zastosowano komplementarne metody spektroskopowe, chromatograficzne, spektrometrii mas i termooanalityczne do określenia ich mikrostruktury, topologii, średniej masy molowej, dyspersyjności i właściwości termicznych. Nanocząstki z karwedilolem otrzymano metodą emulgowania z odparowaniem rozpuszczalnika i oceniono pod względem średniej wielkości, polidispersyjności, potencjału zeta, morfologii, efektywności enkapsulacji (EE) i zawartości leku (DL). Przestrzeń formulacyjną analizowano z wykorzystaniem planu centralnego złożonego, modeli powierzchni odpowiedzi, analizy wariancji (ANOVA) typu III, analizy głównych składowych i funkcji użyteczności Derringera–Suicha.

Dla układów PCL/Pluronic[®] F-68, PCL/PVA, PLLA/Pluronic[®] F-68 i PLLA/PVA wykazano, że wielkość cząstek i polidispersyjność zależały głównie od interakcji matrycy polimerowej i stabilizatora. PCL/PVA charakteryzował się najmniejszym średnim rozmiarem cząstek (około 93 nm) a PLLA/PVA - najwyższą jednorodnością (PDI około 0,09). Matryce PCL zapewniały wyższe wartości EE i DL. Analiza wielokryterialna potwierdziła konieczność równoczesnej oceny wszystkich parametrów. W kolejnym etapie przebadano czterdzieści dwie termowrażliwe formulacje poloksamerowe. Na podstawie wartości temperatury żelowania i charakterystyki reologicznej wytypowano układ z 1% alginianem sodu, o temperaturze przejścia żol–żel $31,7 \pm 0,8^\circ\text{C}$ i module zachowawczym $G' = 22,0 \text{ kPa}$ w 37°C .

Opracowany schemat prowadzi od identyfikacji zależności struktura–właściwości do wyboru nanonośnika i termowrażliwej platformy aplikacyjnej. Dalsza walidacja obejmuje badania uwalniania, degradacji hydrolitycznej, cytotoksyczności oraz ocenę farmakokinetyczno-farmakodynamiczną *in vivo*. Połączenie komplementarnych metod analitycznych z projektowaniem eksperymentów ogranicza liczbę prób i wspiera zasobooszczędny rozwój systemów dostarczania leków dla terapii nadciśnienia.

Podziękowania

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki (NCN) w ramach grantu OPUS 26 nr umowy UMO-2023/51/B/NZ7/00336.



S06 WS08

Wykorzystanie glonów (mikroalg) jako biopestycydów jako innowacyjna i zrównoważona alternatywa dla konwencjonalnego rolnictwa

Agata Jabłońska-Trypuć

*Politechnika Białostocka
Wydział Budownictwa i Nauk o Środowisku
Katedra Chemii, Biologii i Biotechnologii
ul. Wiejska 45E
15-351 Białystok*

e-mail: a.jablonska@pb.edu.pl

Współczesne rolnictwo dąży do pogodzenia wysokiej wydajności z ochroną środowiska. Mimo spadku zużycia syntetycznych pestycydów w UE, ich sprzedaż pozostaje wysoka. Tradycyjne syntetyczne pestycydy stwarzają jednak ryzyko skażenia wód, gleby i żywności, a ich wpływ na ekosystem oraz na życie i zdrowie ludzi wciąż wymaga dokładnych badań.

W poszukiwaniu bezpiecznych alternatyw przeanalizowano między innymi naturalne olejki eteryczne. Badania wykazały, że olejki z trawy cytrynowej oraz tymiankowy wykazują najwyższą skuteczność przeciwgrzybową (szczególnie wobec patogenów z rodzaju *Fusarium*), konkurując z syntetyczną dimoksytrobina.

Kluczową innowacją jest jednak wykorzystanie biomasy mikroalg. Technologia ta wpisuje się w gospodarkę o obiegu zamkniętym z czterech powodów:

- Ograniczenie tradycyjnej chemii: Redukcja substancji toksycznych w ekosystemie.
- Elicytacja: Stymulowanie naturalnej odporności i wigoru roślin.
- Ekologiczny cykl życia: Hodowla w bioreaktorach na nieużytkach lub z użyciem ścieków.
- Biodegradowalność: Całkowite bezpieczeństwo dla ludzi i zapylaczy (np. pszczoł).

Obecne badania skupiają się na medium po hodowli glonów *Chlorella sp.* Weryfikowane są jego właściwości: brak toksyczności, właściwości bionawozowe oraz potencjał w biodegradacji trudnych zanieczyszczeń (np. izofetamidu).

Przejście od konwencjonalnej, chemicznej ochrony roślin do rozwiązań biologicznych opartych na mikroalgach i ich metabolitach jest kluczem do wdrożenia zrównoważonego rolnictwa przyszłości. Wyniki badań dowodzą, że naturalne preparaty mogą skutecznie konkurować z syntetycznymi pestycydami pod względem efektywności, nie niosąc za sobą ryzyka ekotoksykologicznego. Dalszy rozwój technologii opartej na *Chlorella sp.* daje realną szansę na wdrożenie bezpiecznych, biodegradowalnych i wysoce wydajnych bio-stymulatorów oraz bio-pestycydów na rynku rolnym.



S06 WS09

Analiza ilościowa leków, surowców roślinnych i żywności na bazie widm IR i Ramana

Roman Szostak

*Wydział Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego;
ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław;
roman.szostak@uwr.edu.pl*

Większość rutynowych oznaczeń ilościowych substancji aktywnych w lekach, związków biologicznie czynnych w materiale roślinnym oraz substancji odżywczych w produktach spożywczych opiera się na analizie ekstraktów z wykorzystaniem metod chromatograficznych i spektrofotometrycznych. Procedury te wymagają sporych ilości badanego materiału, są czasochłonne i drogie. Alternatywą dla nich mogą być analizy próbek, w postaci natywnej, wykorzystujące spektroskopię oscylacyjną. Proporcjonalność sygnałów, w widmach IR i Ramana, do stężeń substancji obecnych w próbkach umożliwia wykorzystanie widm oscylacyjnych do analiz ilościowych. Oznaczenia mają miejsce w oparciu o modele kalibracyjne definiujące zależności pomiędzy widmami a stężeniami analizowanych składników. Najpowszechniej używaną do budowy tego typu modeli ilościowych techniką modelowania wielowymiarowego jest metoda częściowych najmniejszych kwadratów PLS.

Wyniki oznaczeń, metodą PLS na bazie widm IR i Ramana, zawartości substancji aktywnych w tabletkach, kapsułkach, roztworach, zawiesinach, maściach, żelach i czopkach oraz substancji aktywnych i składników odżywczych w ziołach, i artykułach spożywczych wskazują na olbrzymi potencjał omawianych procedur w zastosowaniach przemysłowych. Minimalizacja błędów oznaczeń wymaga starannego zaplanowania eksperymentu, prawidłowego przeprowadzenia pomiarów i walidacji opracowanych modeli kalibracyjnych.



S06 WS10

Profilowanie i bioobrazowanie pierwiastków w próbkach biologicznych i klinicznych metodami ICP-MS i LA-ICP-MS

Anetta Hanc

*Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Chemii, Zakład Analizy Śladowej
ul Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań
e-mail: anetta.hanc@amu.edu.pl*

Pierwiastki obecne w organizmie człowieka odgrywają kluczową rolę w przebiegu procesów biologicznych, a zaburzenia ich homeostazy mogą towarzyszyć rozwojowi wielu chorób. Profilowanie pierwiastkowe materiału biologicznego dostarcza cennych informacji o stanie fizjologicznym i patologicznym organizmu oraz sprzyja identyfikacji potencjalnych biomarkerów. Szczególne znaczenie przypisuje się pierwiastkom śladowym, takim jak miedź, cynk, selen czy molibden, których stężenia mogą odzwierciedlać zmiany zachodzące w organizmie.

W niniejszym wystąpieniu przedstawione zostanie zastosowanie spektrometrii mas z jonizacją w plazmie indukcyjnie sprzężonej (ICP-MS) oraz ablacji laserowej połączonej z ICP-MS (LA-ICP-MS) do analizy próbek biologicznych i klinicznych. Technika ICP-MS umożliwia jednoczesne oznaczanie wielu pierwiastków na poziomach śladowych i ultraśladowych, pozwalając na uzyskanie charakterystycznego profilu pierwiastkowego badanych próbek. Analizy mogą obejmować różnorodne materiały biologiczne i kliniczne, takie jak krew, surowica, osocze, mocz, ślina, włosy czy tkanki. Istotnym elementem badań jest także opracowywanie i optymalizacja procedur analitycznych zapewniających dokładne i spójne oznaczenia w złożonych matrycach biologicznych.

Uzupełnieniem analiz ilościowych jest bioobrazowanie pierwiastków z wykorzystaniem techniki LA-ICP-MS, które umożliwia określenie ich przestrzennego rozmieszczenia w strukturach tkankowych. Połączenie analizy wielopierwiastkowej z bioobrazowaniem dostarcza kompleksowych informacji o składzie chemicznym i rozmieszczeniu pierwiastków w badanych próbkach. W celu zapewnienia miarodajności wyników stosowane są działania obejmujące walidację procedur, ocenę niepewności pomiaru, wykorzystanie materiałów odniesienia oraz kontrolę jakości zgodnie z zasadami metrologii chemicznej. Takie podejście zapewnia prawdziwość uzyskiwanych danych i stwarza nowe możliwości zastosowania technik ICP-MS i LA-ICP-MS w badaniach biomedycznych i klinicznych. Uzyskane wyniki wskazują na duży potencjał profilowania pierwiastkowego i bioobrazowania w identyfikacji biomarkerów oraz wspomaganiu badań nad mechanizmami rozwoju chorób.



S06 WS11

Od próbki ścieków do obrazu społeczeństwa: zastosowanie epidemiologii ściekowej do monitorowania zażywania substancji psychoaktywnych

Agnieszka Klupczyńska-Gabryszak^a, Szymon Plewa^a, Eliza Matuszewska-Mach^a, Dagmara Pietkiewicz^b, Weronika Pierz^{a,c}, Wiktoria Kurzeja^{a,d}, Natalia Rzetecka-Mańka^{a,d}, Zenon J. Kokot^a, Jan Matysiak^a

^aUniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu, Katedra i Zakład Chemii Nieorganicznej i Analitycznej; Rokietnicka 3, 60-806 Poznań; aklupczynska@ump.edu.pl;

^bUniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu, Centrum Innowacyjnej Technologii Farmaceutycznej;

^cUniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu, Studenckie Towarzystwo Naukowe;

^dUniwersytet Medyczny im. Karola Marcinkowskiego w Poznaniu, Szkoła Doktorska

W ostatnich latach obserwujemy dynamiczny rozwój nowego trendu w badaniach środowiskowych - epidemiologii opartej na analizie ścieków (epidemiologii ściekowej, ang. *wastewater-based epidemiology*). Opiera się on na założeniu, że nieoczyszczone ścieki komunalne mogą być uważane za rozcieńczoną próbkę moczu i kału populacji obsługiwanej przez daną oczyszczalnię ścieków. Zatem ilość związków oraz ich metabolitów obecna w ściekach odzwierciedla spożycie tych środków przez dane społeczeństwo. Analizy z zakresu epidemiologii ściekowej dostarczają obiektywnych danych pozwalających na ocenę wzorców zażywania substancji oraz trendów narażenia w skali populacyjnej bez konieczności opierania się na deklaracjach respondentów. Kolejną zaletą stanowi dostarczanie wyników w czasie zbliżonym do rzeczywistego, co umożliwia śledzenie krótkoterminowych trendów.

W ramach przeprowadzonych badań wykonano analizę ilościową narkotyków i ich głównych metabolitów w próbkach ścieków komunalnych. Próbki zostały pobrane w oczyszczalniach ścieków znajdujących się na terenie województwa wielkopolskiego, a następnie poddane wieloetapowej procedurze przygotowania obejmującej dodanie mieszaniny wzorców wewnętrznych, filtrację oraz ekstrakcję do fazy stałej. Stężenie analitów oznaczono z wykorzystaniem wysokosprawnego chromatografu cieczonego sprzężonego ze spektrometrem mas z potrójnym kwadrupolem pracującym w trybie monitorowania wielokrotnych reakcji fragmentacji (MRM). Analiza obejmowała 10 związków, m. in. amfetaminę i pochodne, kokainę, nowe substancje psychoaktywne. Uzyskane wyniki stężeń przeliczono na mg/dzień/1000 osób, uwzględniając dobowe przepływy oczyszczalni oraz liczbę mieszkańców obsługiwanych przez daną oczyszczalnię ścieków.

We wszystkich analizowanych próbkach ścieków, narkotykiem występującym w najwyższym stężeniu była amfetamina. Różnice w poziomach pozostałości narkotyków w ściekach zaobserwowane pomiędzy poszczególnymi dniami tygodnia wskazały na zwiększone zażywanie 3,4-metylenodioksymetamfetaminy (MDMA, ecstasy) podczas weekendów. Również w przypadku metabolitu kokainy (benzoiloeogoniny) widoczny był trend weekendowy wskazujący na rekreacyjne zażywanie tej substancji. Ponadto przeprowadzone badania wykazały różnice między badanymi miastami, zarówno pod względem rodzaju, jak i stężenia nielegalnych substancji.

Zastosowane nowatorskie podejście analityczne stanowi wartościowe uzupełnienie dostępnych metod monitorowania problemu narkotyków i narkomanii w społeczeństwie, w tym pośrednich i długotrwałych metod ankietowych czy danych pochodzących z konfiskat policyjnych i raportów medycznych. Opracowywanie nowych metodyk z zakresu epidemiologii ściekowej zwiększa jej znaczenie jako narzędzia monitorowania zdrowia publicznego i środowiska.

Badania zostały sfinansowane przez Urząd Marszałkowski Województwa Wielkopolskiego w Poznaniu (umowa nr 72/DZ.III/2023).



S06 WS12

Od struktury związku koordynacyjnego do funkcji katalitycznej - projektowanie prekatalizatorów do syntezy materiałów polimerowych

Kacper Pobłocki^{1,2}, Marta Pawlak¹, Marzena Białek², Katarzyna Jarzemska³, Radosław Kamiński³,
Łukasz Ponikiewski⁴, Piotr Bruździak⁴, Dagmara Jacewicz¹

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

²Uniwersytet Opolski, Wydział Chemii i Farmacji, 45-052 Opole, ul. Oleska 48

³Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, 02-089 Warszawa, ul. Żwirki i Wigury 101

⁴Politechnika Gdańska, Wydział Chemii, 80-233 Gdańsk, ul. G. Narutowicza 11/12

e-mail: dagmara.jacewicz@ug.edu.pl

Projektowanie wydajnych i selektywnych układów katalitycznych wymaga poznania zależności między strukturą związku koordynacyjnego, jego właściwościami fizykochemicznymi a aktywnością w danym procesie katalitycznym. Dobrze zdefiniowane związki koordynacyjne metali przejściowych stanowią szczególnie interesującą grupę prekatalizatorów, których reaktywność można kształtować poprzez dobór centrum metalicznego, ligandów donorowych i geometrii sfery koordynacyjnej.

Podstawę badań stanowią racjonalne projektowanie, synteza i wielokierunkowa charakterystyka związków koordynacyjnych przeznaczonych do procesów oligomeryzacji i polimeryzacji olefin oraz wybranych monomerów polarnych. Analizowane układy zawierają m.in. jony wanaadu(IV/V), niklu(II), kobaltu(II) i rodu(III/IV), stabilizowane ligandami O-, N- i S-donorowymi. Ich charakterystykę prowadzono z wykorzystaniem metod spektroskopowych, rentgenostrukturalnych, termooanalitycznych, analizy elementarnej oraz badań morfologii i tekstury materiałów, w tym pomiarów BET, objętości i rozkładu porów. Badania eksperymentalne uzupełniały obliczenia DFT i symulacje dynamiki molekularnej, wspierające interpretację zależności między strukturą sfery koordynacyjnej prekatalizatora, jego właściwościami fizykochemicznymi oraz aktywnością i selektywnością katalityczną, a także analizę mechanizmów badanych procesów. Analizowano wpływ rodzaju jonu metalu, właściwości elektronowych i sposobu koordynacji ligandów, geometrii kompleksu oraz izomerii *cis/trans* na aktywność i selektywność układów katalitycznych. Oceniano również znaczenie rodzaju aktywatora i warunków reakcji dla przebiegu procesu oraz właściwości otrzymywanych produktów. Takie podejście umożliwia identyfikację elementów budowy prekatalizatorów odpowiedzialnych za ich reaktywność.

Badane kompleksy metali przejściowych zastosowano w procesach: oligomeryzacji i (ko)polimeryzacji etylenu, wyższych α -olefin, alkoholu alilowego i jego pochodnych oraz w procesie oligomeryzacji izocyjanów. Wykazano, że modyfikacja sfery koordynacyjnej centrum metalicznego wpływa na aktywność układu katalitycznego, selektywność procesu i właściwości fizykochemiczne produktów.

Integracja syntezy kompleksów metali przejściowych, ich wielokierunkowej charakterystyki oraz badań katalitycznych umożliwia racjonalne projektowanie prekatalizatorów o zdefiniowanych właściwościach. Korelacja parametrów strukturalnych i elektronowych z aktywnością katalityczną pozwala identyfikować czynniki determinujące przebieg procesu i ukierunkowywać syntezę materiałów polimerowych.

Podziękowania: Projekt finansowany ze środków Ministra Edukacji i Nauki w ramach Programu „Perły Nauki” nr. projektu PN/01/0137/2022.

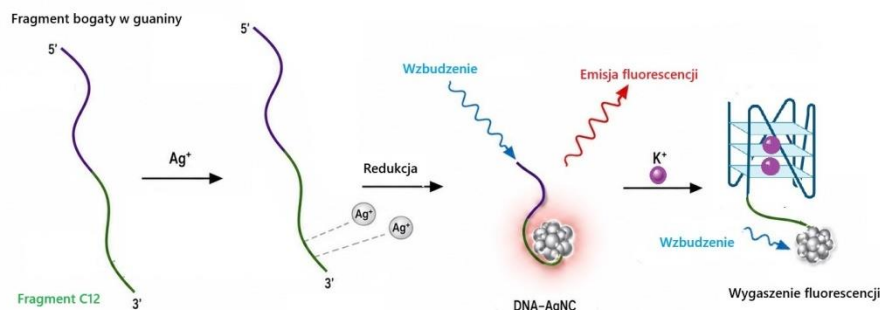


Potencjał aplikacyjny nanoklasterów srebra syntetyzowanych na matrycy DNA

Anna Dembska

*Zakład Chemii Analitycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza;
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;
aniojka@amu.edu.pl*

Nanoklaster srebra (AgNCs) wytwarzane na matrycach DNA należą do nowej klasy znaczników fluorescencyjnych, charakteryzujących się doskonałą jasnością, fotostabilnością oraz biokompatybilnością [1]. Pierwszej syntezy AgNCs na matrycy DNA bogatej w zasady cytozynowe (5'-AGGTCGCCGCCC-3') dokonał Dickson i współpracownicy w 2004 roku [2]. Od tego czasu udowodniono, że emisję AgNCs-DNA można sterować poprzez zmianę warunków eksperymentalnych (tj. pH, rodzaj buforu, dodatek soli, stężenie reagentów) lub stosowanie sekwencji DNA różniących się długością, składem oraz strukturą. Układy AgNCs-DNA znajdują zastosowanie od detekcji jonów metali, małych cząsteczek, kwasów nukleinowych, białek po bioobrazowanie oraz terapię nowotworową [1]. Połączenie specyficznego rozpoznawania sekwencji kwasów nukleinowych z właściwościami emisyjnymi DNA-AgNCs umożliwiło opracowanie różnorodnych strategii detekcji DNA. W zależności od konstrukcji biosensora zmiana sygnału może wynikać bezpośrednio z hybrydyzacji sekwencji docelowej z sondą lub ze zmian konformacyjnych matrycy DNA, które wpływają na właściwości fluorescencyjne AgNCs. Na przykład, wiele grup badawczych prowadzi prace z wykorzystaniem G-kwadrupleksów (G4) DNA jako elementów rozpoznających w biosensorach służących do wykrywania jonów potasu.



Rys.1. Nanoklaster srebra na matrycy zawierającej G-kwadrupleks do oznaczania zmian stężenia jonów potasu.

Zaprojektowana przez nas sonda oligonukleotydowa (Rys. 1) zbudowana jest z dwóch domen: jednej wrażliwej na obecność jonów potasu (G4) oraz drugiej, odpowiedzialnej głównie za sygnał analityczny dzięki możliwości tworzenia się fluorescencyjnych AgNCs na fragmencie bogatym w cytozyny [3].

Literatura:

1. Chen, Y., Phipps, L. M., Werner, J. H., Chakraborty, S., Martinez, J. S. Acc. Chem. Res. 2008, 51, 12756.
2. Petty, J. T.; Zheng, J.; Hud, N. V.; Dickson, R. M. J. Am. Chem. Soc. 2004, 126, 207
3. Filipczuk, P.; Fedoruk-Wyszomirska, A.; Nowak-Karnowska, J.; Pietralik-Molińska, Z.; Banachowicz, E.; Kozak, M.; Dembska, A. Int. J. Mol. Sci., 2025, 26(10), 4914.



S06 WS14

Narzędzia oceny zieloności w analityce chemicznej

Marek Tobiszewski

Katedra Chemii Analitycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk

marek.tobiszewski@pg.edu.pl

Wielokryterialne podejmowanie decyzji (WPD) jest narzędziem wspomagającym proces podejmowania decyzji poprzez umożliwienie dokonywania wyborów w sposób systematyczny. Gdy jako kryteria stosowane są tradycyjne wskaźniki zieloności, WPD może być wykorzystywane jako narzędzie oceny zieloności. Ze względu na wielowymiarowy charakter pojęcia zieloności podejście wielokryterialne jest szczególnie odpowiednie do jego oceny. WPD została zastosowana do oceny zieloności procedur analitycznych, rozpuszczalników organicznych, cieczy jonowych, rozpuszczalników głęboko eutektycznych, faz ruchomych w LC oraz odczynników do upochadniania. W każdym przypadku uzyskano pełen ranking wariantów wraz z przypisaniem każdemu z nich numerycznej wartości zieloności. Pozwoliło to na formułowanie świadomych rekomendacji dotyczących wyboru bardziej przyjaznych środowisku rozpuszczalników i odczynników oraz identyfikację najbardziej zielonych spośród nich.

Obecnie dostępnych jest wiele narzędzi do oceny zieloności procedur analitycznych. Brak standaryzacji ich stosowania często prowadzi do (prawdopodobnie) niezamierzonego błędnego ich wykorzystania. Wielowymiarowa analiza statystyczna zbioru wyników oceny zieloności, uzyskanego z wykorzystaniem różnych narzędzi, wykazała, że często dostarczają one wyników wzajemnie skorelowanych. Drugi zbiór danych posłużył do oceny odtwarzalności uzyskiwanych wyników. W konsekwencji zaproponowano praktyczne zalecenia dotyczące stosowania narzędzi oceny zieloności. Spełnianie tych zaleceń sprzyja bardziej ujednoliconemu podejściu, zapewnia większą spójność uzyskiwanych wyników oraz umożliwia ich bardziej miarodajną interpretację. CLEANS GUIDELINES stanowi łatwy do zapamiętania akronim wyrażający najważniejsze zalecenia. CLEANS to zbiór rekomendacji skierowanych do analityków opracowujących nowe procedury, których celem jest pełna charakterystyka wpływu procedury na środowisko oraz identyfikacja potencjalnych zagrożeń. Szczególne znaczenie ma uwzględnienie ilości generowanych odpadów, zapotrzebowania na energię, czasu trwania analizy, a także pełnej informacji o rodzaju i ilości wszystkich zastosowanych odczynników oraz rozpuszczalników. Z kolei GUIDELINES stanowią praktyczne ramy umożliwiające właściwy dobór i efektywne stosowanie narzędzi metrycznych Zielonej Chemii Analitycznej oraz pokrewnych koncepcji. Podkreślają one znaczenie prawidłowego rozumienia zasad działania tych narzędzi oraz ich odpowiedniego doboru do konkretnego zadania.

Należy również zauważyć, że nowe narzędzia metryczne pojawiające się w literaturze zazwyczaj nie wprowadzają nowych koncepcji oceny. Oferują one jedynie nowe sposoby prezentacji wyników, podczas gdy same kryteria oceny pozostają takie same jak w wcześniejszych opracowaniach. Bardzo pożądane byłoby natomiast opracowanie i wdrożenie oceny procedur analitycznych opartej na analizie cyklu życia (LCA – Life Cycle Assessment), która zapewnia znacznie bardziej szczegółową i kompleksową ocenę ich wpływu na środowisko.

Yahya, L. A., Vakh, C., Dushna, O., Kalisz, O., Bocian, S., & Tobiszewski, M. (2025). Guidelines on the proper selection of greenness and related metric tools in analytical chemistry—a tutorial. *Analytica Chimica Acta*, 1357, 344052.



S06 WS15

Nowe podejście do oznaczania składników mieszanin chemicznych: integracja spektroskopii korelacyjnej z analizą głównych składowych

Grażyna Czerniak¹, Bogumiła Kupcewicz²

¹ Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska

² Wydział Farmaceutyczny Collegium Medicum UMK

e-mail: Grazyna.Czerniak@pbs.edu.pl, kupcewicz@cm.umk.pl

Wykorzystanie metod chemometrycznych stanowi istotny element współczesnej chemii analitycznej w analizie ilościowej mieszanin o złożonym składzie chemicznym. Oznaczanie stężeń poszczególnych składników w takich układach jest nieodłącznie związane z kosztami i wymaga czasu. Połączenie technik spektroskopowych z narzędziami matematycznymi pozwala uzyskiwać wyłącznie informacje interesujące dla analityka, przy jednoczesnym ograniczeniu liczby koniecznych eksperymentów.

W spektroskopii analizy ilościowej z wykorzystaniem metod chemometrycznych opierają się bądź to na klasycznej metodzie dekompozycji widm na poszczególne kształty czystych form składników (Classical Least Squares - CLS), bądź wykorzystują kalibrację wielowymiarową. Podejścia te zakładają liniową zależność między absorbancją a stężeniem składników, zgodnie z prawem Lamberta-Beera. Ograniczeniem metody CLS jest konieczność dysponowania widmami referencyjnymi wszystkich składników obecnych w próbce, w tym substancji „zakłócających”. Dodatkowo, w świetle ostatnich doniesień, ze względu na fakt, że prawo Lamberta-Beera stanowi jedynie przybliżenie rzeczywistych oddziaływań promieniowania z materią, konieczne jest poszukiwanie rozwiązań wolnych od tych ograniczeń.

W referacie przedstawione zostanie nowe podejście do ilościowego oznaczania składników na podstawie pomiarów spektroskopowych techniką ATR-FTIR (Attenuated Total Reflection - Fourier Transform Infrared Spectroscopy). Zaproponowana strategia integruje dwie metody analizy widm - Score-based Quantitative Principal Component Analysis (SQPCA) oraz dwuwymiarową spektroskopię korelacyjną (2D-COS) w wariancie dwuśladowym 2T2D (two-Trace-two-Dimensional). Metodę zastosowano do oznaczania czterech flawonoidów w ekstraktach z korzeni *Scutellaria baicalensis* Georgi.

Ze względu na wysoką złożoność widm, wynikającą z licznych, częściowo nakładających się pasm, kluczowym etapem była odpowiednia ich transformacja, zwiększająca efektywność procedury oznaczania składników z użyciem SQPCA. W tym celu wykorzystano widmo dysrelacyjne 2T2D do opracowania filtru cyfrowego (DF), umożliwiającego wyodrębnienie z widma ATR-FTIR danej próbki sygnałów związanych z analizowanymi związkami.

Wartości stężeń flawonoidów uzyskane metodą SQPCA-DF zestawiono z wynikami wysokosprawnej chromatografii cienkowarstwowej (HPTLC). Stwierdzono dobrą zgodność między metodami, co potwierdza skuteczność matematycznego przetwarzania sygnałów w uzyskaniu zadowalającej zdolności rozdzielczej widm oraz użyteczność opracowanego podejścia w analizie złożonych próbek.



S06 WS16

Modelowanie retencji w chromatografii biomimetycznej z wykorzystaniem metod uczenia maszynowego

Krzesimir Ciura

*Katedra i Zakład Chemii Fizycznej, Wydział Farmaceutyczny, Gdański Uniwersytet Medyczny Al.
Gen. J. Hallera 107, 80-416 Gdańsk;
krzesimir.ciura@gumed.edu.pl*

Ocena właściwości fizykochemicznych związków na wczesnych etapach odkrywania leków wymaga metod, które jak najlepiej odzwierciedlają procesy zachodzące w układach biologicznych. Chromatografia biomimetyczna, w szczególności z wykorzystaniem kolumn z unieruchomioną sztuczną błoną fosfolipidową (IAM), dostarcza parametrów retencji odzwierciedlających powinowactwo cząsteczek do błon komórkowych, stanowiąc bardziej fizjologicznie uzasadnioną alternatywę dla klasycznych wskaźników lipofilowości.

W pracy zaprezentowano dwuetapową strategię modelowania retencji IAM z wykorzystaniem metod uczenia maszynowego. W pierwszym etapie opracowano modele QSRR dla zróżnicowanego chemicznie zbioru obejmującego ponad 500 związków, w tym zarówno stosowane leki, jak i nowe pochodne sulfonamidowe o potencjalnym działaniu przeciwnowotworowym. Do budowy modeli o charakterze interpretowalnym wykorzystano deskryptory molekularne obliczone z użyciem programów Chemicalize oraz ACD/Labs. Model wielorakiej regresji liniowej (MLR), zoptymalizowany z zastosowaniem algorytmu genetycznego, wykazał, że najistotniejszymi czynnikami wpływającymi na wartości CHI_{IAM} są lipofilowość, ładunek cząsteczki oraz jej maksymalne pole przekroju. Następnie zastosowano metody uczenia maszynowego oparte na podobieństwie strukturalnym, przede wszystkim lokalnie ważoną regresję jądrową (KwLPR), uzyskując wyraźną poprawę jakości predykcji ($Q^2 = 0,812$; $RMSEP = 6,739$).

Drugi etap badań skoncentrowano na serii pochodnych sulfonamidowych. Model oparty na metodzie wektorów nośnych (SVM) i fingerprintach ECFP (extended-connectivity fingerprints) osiągnął wysoką zdolność predykcyjną ($Q^2 = 0,810$). Analiza interpretacyjna z wykorzystaniem metody SHAP (SHapley Additive exPlanations) wskazała, że kluczowe znaczenie dla retencji mają określone fragmenty strukturalne, zwłaszcza ugrupowania aromatyczne oraz zawierające atomy azotu. Wykazano również, że eksperymentalnie wyznaczone powinowactwo do fosfolipidów (CHI_{IAM}) istotnie koreluje z aktywnością przeciwnowotworową wobec linii komórkowych HCT-116, HeLa i MCF-7, co potwierdza biologiczną wartość parametrów uzyskiwanych metodą IAM.

Uzyskane wyniki pokazują, że połączenie danych z chromatografii biomimetycznej z interpretowalnymi modelami uczenia maszynowego stanowi efektywne narzędzie wspierające ocenę właściwości związków na wczesnym etapie odkrywania leków. Zaproponowane podejście łączy możliwość mechanistycznej interpretacji z wysoką skutecznością predykcyjną, wspierając racjonalny dobór i optymalizację kandydatów na leki o pożądanых właściwościach farmakokinetycznych i farmakodynamicznych.



S06 WS17

Chemiczne aspekty kontrolowanego wypalania wrzosowisk w Polsce

Agnieszka Parzych¹, Paulina Piskula¹

¹*Zakład Chemii i Toksykologii Środowiska, Instytut Geografii, Uniwersytet Pomorski w Słupsku;
ul. Arciszewskiego 22b, 76-200 Słupsk
e-mail: agnieszka.parzych@upsl.edu.pl*

Kontrolowane wypalanie jest jednym z narzędzi zarządzania zasobami i różnorodnością wrzosowisk, a także sposobem ich ochrony. Ogień ma ogromny wpływ na globalny obieg węgla, przekształcając jego organiczne zasoby zakumulowane w glebie, ściółce i roślinności w CO₂. Aktualne wyniki badań wskazują, że ogień wywiera istotny wpływ na skład chemiczny powierzchniowych warstw gleby. Modyfikuje nie tylko zawartość, ale i formę zakumulowanych w glebie składników, co związane jest z powstawaniem popiołu, będącego źródłem wielu pierwiastków. Ogień powoduje również straty niektórych składników odżywczych oraz wpływa na mobilność i biodostępność dla roślin wielu niezbędnych makro- i mikroskładników, na skutek czego zmiana ulega również pH gleby. Zmiany biodostępności składników odżywczych w glebie w trakcie wypalania są istotnym czynnikiem z punktu widzenia ekologii oraz ochrony środowiska.

Celem przeprowadzonych badań było dostarczenie badaczom, właścicielom i zarządom gruntów wskazówek odnośnie potencjalnych skutków kontrolowanego wypalania wrzosowisk na właściwości powierzchniowych i przypowierzchniowych warstw gleby oraz na funkcjonowanie regenerujących się krzewinek wrzosu zwyczajnego. Cel ten zrealizowano poprzez cykliczne pobieranie próbek gleby i wrzosu zwyczajnego oraz wykonanie szeregu analiz chemicznych. Zabiegi kontrolowanego wypalania przeprowadzono na wrzosowiskach w Tucholi (Polska północna), w Drygalech (Polska północno-wschodnia) oraz w Przemkowie (Polska południowo-zachodnia).

Wyniki badań dotyczące właściwości powierzchniowych i przypowierzchniowych warstw gleby wskazują, że eksperyment kontrolowanego wypalania wrzosowisk zyskuje szersze znaczenie ekologiczne, niż to opisywane do tej pory, dotyczące zarządzania wrzosowiskami ze względu na ochronę cietrzewia. Wpływ ognia na gleby jest najbardziej widoczny w wierzchniej warstwie gleby (ektohumusie), którego składniki są wrażliwe na wysokie temperatury. W głębiej położonych warstwach mineralnych gleby efekt ten jest znacznie słabszy. Gleby badanych wrzosowisk były ubogie w składniki odżywcze. Najbardziej deficytowym składnikiem był fosfor. Kwaśny odczyn gleb (pH<5,0) ograniczał biodostępność makroskładników dla roślin. Po zabiegu kontrolowanego wypalenia wrzosowisk zaobserwowano istotny statystycznie (p<0.01) wzrost zawartości Ca w powierzchniowych warstwach gleby w porównaniu do powierzchni kontrolnych, związany z dopływem biogenów z popiołu. Bezpośrednio po wypaleniu wrzosowisk nie zaobserwowano istotnych statystycznie zmian pH gleby ze względu na małą ilość opadów deszczu i ograniczoną mobilność składników. W skład powstałego popiołu wchodziły mineralne formy różnych pierwiastków, które mogą znacznie zwiększać biodostępność dla roślin składników odżywczych w stosunkowo krótkim czasie. Kondycja życiowa *Calluna vulgaris* na badanych wrzosowiskach była słaba. Stwierdzono obecność wielu martwych pędów i korzeni. Utrzymujące się przez dłuższy czas niedobory składników odżywczych ograniczały nie tylko wzrost i rozwój oraz przyspieszały także starzenie się wrzosu. Wyniki naszych badań wskazują, że kontrolowane wypalenie wrzosowisk spowodowało istotne statystycznie różnice w zawartości N, P, K, Mg, Zn, Cu i Mn w pędach (p<0.01) oraz Mn w korzeniach wrzosu (p<0.05) w porównaniu do powierzchni kontrolnej. Proces wypalania wrzosowisk przemodelował stosunki pomiędzy ważnymi składnikami odżywczymi w *C. vulgaris*. Spowodował istotne statystycznie (p<0.01) zmiany w wartościach stosunków N/P, K/Mg i Fe/Mn w pędach w porównaniu do powierzchni kontrolnej.



S06 WS18

Modyfikowane mieszane tlenki metali jako fotokatalizatory degradacji antybiotyków w środowisku wodnym

Elżbieta Regulska

*Facultad de Farmacia, Universidad de Castilla-La Mancha, Calla Almansa 14, 02008 Albacete, Hiszpania;
Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku, Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok, Polska;
e-mail: Elzbieta.regulska@uclm.es*

Antybiotyki należą do mikrozanieczyszczeń słabo usuwanych w konwencjonalnych procesach oczyszczania ścieków. Te bowiem są projektowane pod kątem usuwania materii organicznej i biogenów, a nie związków farmaceutycznych. W efekcie znaczna część antybiotyków przedostaje się w postaci niezmienionej lub aktywnych metabolitów do ścieków oczyszczonych, rzek, wód gruntowych, a nawet wody pitnej na całym świecie. Brak jest przy tym prawnych wymogów dotyczących kontroli zawartości antybiotyków w ściekach. Nawet przy bardzo niskich stężeniach, rzędu nanogramów na litr, obecność tych związków w środowisku sprzyja narastaniu oporności przeciwdrobnoustrojowej, którą WHO uznaje za jedno z kluczowych zagrożeń dla zdrowia publicznego.

W ramach wykładu przedstawiam fotokatalizę heterogeniczną jako metodę usuwania antybiotyków z wykorzystaniem światła słonecznego. W odróżnieniu od metod separacyjnych, proces ten prowadzi do całkowitej mineralizacji zanieczyszczeń, a nie jedynie do ich przeniesienia między fazami. Zastosowane przeze mnie fotokatalizatory obejmują mieszane tlenki metali domieszkowane jonami metali, kompozyty mieszanych tlenków metali dekorowane nanocząstkami złota oraz kompozyty z materiałami węglowymi, takimi jak zredukowany tlenek grafenu. Modyfikacje te zapewniają aktywność katalizatorów w zakresie światła widzialnego, zwiększając ich potencjalne zastosowanie praktyczne.

Omówię wyniki degradacji oksytetracykliny z użyciem domieszkowanych mieszanych tlenków metali, tygocykliny, antybiotyku trzeciej generacji stosowanego w zakażeniach wielolekoopornych, z użyciem kompozytów tlenku tytanu, ferrytu niklu i nanocząstek złota oraz citalopramu i trazodonu z wykorzystaniem kompozytów z udziałem zredukowanego tlenku grafenu.^[1-3] Poza wydajnością degradacji, kluczowym elementem badań jest ocena biokompatybilności produktów pośrednich, przeprowadzona na modelach obejmujących krwinki czerwone, komórki odpornościowe, fibroblasty i hepatocyty. Produkty degradacji okazały się bezpieczne biologicznie, co potwierdza możliwość praktycznego wdrożenia badanych fotokatalizatorów.

Przedstawione podejście łączy ocenę skuteczności środowiskowej z oceną bezpieczeństwa biologicznego produktów degradacji, co stanowi warunek konieczny dla praktycznego zastosowania fotokatalizy w oczyszczaniu wód z antybiotyków.

Literatura

1. E. Regulska, J. Breczko, A. Basa, K. Niemirowicz-Laskowska and I. Kiszkiel-Taudul, *Materials Science and Engineering: B*, 2022, 285, 115959.
2. K. Niemirowicz-Laskowska, A. Basa, J. Breczko, I. Kiszkiel-Taudul, P. Wielgat, B. Skonieczna, H. Car and E. Regulska, *Surfaces and Interfaces*, 2025, 58, 105889.
3. J. Breczko, A. Basa, K. Niemirowicz-Laskowska, B. Skonieczna, R. López-Martín, J. A. De Toro, H. Car and E. Regulska, *RSC Adv.*, 2025, 15, 41862–41873.



S06 WS19

Generatory mechanizmów reakcji utleniania związków organicznych w fazie wodnej

Bartłomiej Witkowski^{1,*}, Jakub Szlęk², Aleksander Mendyk², Tomasz Gierczak¹

Afiliacja ¹Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, ²Uniwersytet Jagielloński Collegium Medicum w Krakowie

Adres korespondencyjny: CNBCh UW, al. Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warszawa
e-mail bwitk@chem.uw.edu.pl

Związki organiczne są wszechobecne w atmosferze zarówno w fazie gazowej, jak i w postaci rozpuszczonej w kroplach mgły oraz chmur. Lotne związki organiczne (LZO) są emitowane ze źródeł naturalnych oraz w wyniku działalności człowieka, a ich przemiany w atmosferze prowadzą do powstawania drobnych cząstek zawieszonych w powietrzu. Są to m.in. cząstki o średnicy aerodynamicznej poniżej 2.5 μm , określane jako PM_{2.5}. Drobne aerozole rozpraszają i pochłaniają promieniowanie słoneczne, wpływając w ten sposób na bilans radiacyjny Ziemi oraz są zalążkami kondensacji chmur, a także mogą przenikać do płuc i krwiobiegu, przez co stanowią zagrożenie dla zdrowia publicznego.

Związki organiczne mogą stanowić aż 90% masy drobnych i submikronowych aerozoli, przy czym ich znaczną część stanowią wtórne aerozole organiczne (*secondary organic aerosols*, SOA), które powstają w atmosferze w wyniku utleniania organicznych prekursorów. W atmosferze najbardziej rozpowszechnionymi LZO są izopren i monoterpeny emitowane przez roślinność, a ich utlenianie jest istotnym źródłem SOA.

W chemii atmosfery modelowanie reakcji znajduje zastosowanie w prognozowaniu jakości powietrza i zmian klimatu, kształtowaniu polityki środowiskowej oraz zarządzaniu zanieczyszczeniami. Atmosfera jest złożonym układem reakcyjnym, w którym jednym z najważniejszych utleniaczy jest rodnik hydroksylowy (OH). W atmosferze reakcje OH ze związkami organicznymi odpowiadają za powstawanie oraz przemiany SOA, jednak mechanizmy tych reakcji są niezwykle złożone. Z tego względu ręczna analiza takich reakcji jest wysoce niepraktyczna, zwłaszcza wobec tysięcy związków organicznych emitowanych bezpośrednio oraz powstających w atmosferze.

Celem naszych badań jest opracowanie automatycznego generatora mechanizmów utleniania monoterpenu przez rodniki OH w fazie wodnej. Automatyczne generatory mechanizmów reakcji mają wiele potencjalnych zastosowań w chemii atmosfery i środowiska, lecz ich opracowanie wymaga wiarygodnych danych kinetycznych. Informacji takich dostarczają modele zależności struktura–aktywność (*structure–activity relationship*, SAR), które umożliwiają przewidywanie stałych szybkości reakcji oraz dostarczają informacji o wewnątrzcząsteczkowej selektywności utleniaczy w reakcjach ze związkami organicznymi. Wiarygodność modeli SAR zależy jednak od liczby i jakości danych kinetycznych wykorzystanych do ich opracowania oraz walidacji.

Uzyskane wyniki obejmują wielkości stałych szybkości reakcji rodnika OH ze związkami organicznymi wchodzącymi w skład monoterpenu SOA: alkoholami, kwasami karboksylowymi, aldehydami, ketonami oraz estrami. Pomiar kinetyczny przeprowadzono metodą względną w zakresie temperatur 278–328 K, a uzyskane dane pozwoliły na wyznaczenie parametrów aktywacji badanych reakcji. Rozszerzenie kinetycznych baz danych dla reakcji utleniania wybranych związków modelowych przez rodnik OH pozwoliło także na udoskonalenie istniejących modeli SAR oraz analizę atmosferycznych czasów życia i mechanizmów reakcji wybranych prekursorów SOA.

Nanomateriały i ich zastosowanie do usuwania farmaceutyków z wody

Łukasz Wolski¹, Mateusz Rozmyślak¹, Konrad Baran¹, Joanna Wolska¹, Adrian Walkowiak¹, Grzegorz Nowaczyk², Kamila Sobańska³, Piotr Pietrzyk³, Maciej Janicki⁴, Marcin Frankowski¹

¹ Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii, 61-614, Poznań, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8

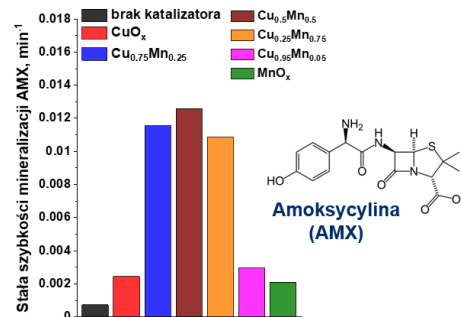
² Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Centrum NanoBioMedyczne, 61-614, Poznań, ul. Wszechnicy Piastowskiej 3

³ Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, 30-387, Kraków, ul. Gronostajowa 2

⁴ Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Biologii, 61-614, Poznań, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 6
wolski.lukasz@amu.edu.pl

Farmaceutyki odgrywają nieocenioną rolę w medycynie umożliwiając skuteczną ochronę życia i zdrowia ludzi. Jednakże wciąż rosnąca produkcja i konsumpcja tych substancji aktywnych, w połączeniu z niewielką efektywnością ich usuwania ze ścieków, przyczyniają się do nieustannego wzrostu stężenia tej grupy związków chemicznych w naturalnych zbiornikach wodnych oraz glebach, prowadząc do narastającego problemu środowiskowego. W przypadku antybiotyków, nawet niewielkie ilości wykrywane obecnie w wodach (rzędu od kilku do kilkuset ng/l, w niektórych przypadkach µg/l) mogą w dłuższej perspektywie prowadzić do wytworzenia przez bakterie mechanizmów obronnych umożliwiając im adaptację do życia w takim środowisku, prowadząc tym samym do powstania szczepów bakterii opornych na działanie antybiotyków [1]. Obecność zanieczyszczeń farmaceutycznych w środowisku może również znacząco zaburzać funkcjonowanie całych ekosystemów wodnych i lądowych. Dlatego też opracowywanie prostych, efektywnych i przyjaznych środowisku metod usuwania farmaceutyków z wody/ścieków jest niezwykle istotne z punktu widzenia ochrony zdrowia oraz środowiska.

Przedmiotem badań jest przedstawienie efektywności różnych metod usuwania farmaceutyków z wody z wykorzystaniem nanomateriałów. Prezentowane wyniki dotyczą przede wszystkim procesów ozonowania w obecności katalizatorów na bazie mieszanych tlenków metali (Rysunek 1), ale a także procesów utleniania z użyciem H₂O₂ i światła [2,3]. W przypadku procesów degradacji, szczególna uwaga poświęcona będzie analizie efektywności mineralizacji zanieczyszczeń, identyfikacji głównych produktów ich utlenienia oraz ocenie ich potencjalnej toksyczności [4]. Istotna uwaga poświęcona będzie również usuwaniu farmaceutyków na drodze adsorpcji z wykorzystaniem wysoko usieciowanych polimerów [5].



Rys. 1. Efektywność mineralizacji amoksylicyny podczas procesu ozonowania z wykorzystaniem katalizatorów na bazie wybranych tlenków metali.

Podziękowania

Autorzy dziękują Narodowemu Centrum Nauki (projekt Sonata nr 2023/51/D/ST5/00216) za wsparcie finansowe prowadzonych badań.

Bibliografia

- [1] P. Barathe, et al., *Journal of Hazardous Materials Letters*, 2024, 5, 100105.
- [2] A. Walkowiak, et al., *Catalysis Today*, 2026, 468, 115739.
- [3] M. Rozmyślak, et al., *Journal of Water Process Engineering*, 2025, 78, 108646.
- [4] K. Baran, et al., *Applied Surface Science Advances*, 2026, 32, 100944.
- [5] J. Wolska, et al., *Separation and Purification Technology*, 2026, 401, 138575.



S06 WS21

Naturalne substancje złożone jako „zielona” alternatywa dla syntetycznych substancji aktywnych w produktach kosmetycznych i chemii gospodarczej

Lucyna Balcerzak¹, Alicja Surowiak¹, Kinga Baberowska¹, Zuzanna Bacińska¹, Eryk Kurowski¹,
Daniel Strub¹

¹Politechnika Wroclawska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Biologicznej i Bioobrazowania
Wybrzeże Wyspiańskiego 29, 50-370 Wrocław
daniel.strub@pwr.edu.pl

Rosnące wymagania dotyczące bezpieczeństwa, skuteczności i wpływu środowiskowego produktów szybko zbywalnych (FMCG) stymulują poszukiwanie nowych składników funkcjonalnych dla kosmetyków i chemii gospodarczej. Jedną z rozważanych grup są naturalne substancje złożone - m.in. ekstrakty roślinne, olejki eteryczne, hydrolaty, frakcje polifenolowe, preparaty bogate w saponiny, żywice - których właściwości wynikają z obecności związków organicznych o potencjalnie addytywnym lub synergistycznym działaniu. Te surowce mogą pełnić w formulacji funkcje przeciwdrobnoustrojowe, przeciwutleniające, sensoryczne, wspomagać ochronę mikrobiologiczną produktu, ograniczać adhezję i rozwój biofilmu lub współdziałać z konwencjonalnymi układami konserwującymi [1]. W Unii Europejskiej substancje aktywne i zawierające ją produkty podlegają odrębnym procedurom oceny i dopuszczenia, a skuteczność musi być potwierdzona metodami adekwatnymi do deklarowanego zastosowania [2,3].

Naturalne mieszaniny złożone mają potencjał przede wszystkim jako standaryzowane, wielofunkcyjne elementy projektowanych formulacji, lecz ich wdrożenie wymaga walidacji aplikacyjnej, oceny toksykologicznej i właściwej ścieżki regulacyjnej. Zmienność surowca i procesu wpływa na skład, kompatybilność z formulacją, powtarzalność skuteczności działania oraz na ślad środowiskowy [4]. W odpowiedzi na te wyzwania Wrocław Tech Fragrance Lab prowadzi badania aplikacyjne nad pozyskiwaniem, charakterystyką i standaryzacją wieloskładnikowych preparatów naturalnych.

Tematem wykładu będzie przedstawienie prac Zespołu w obszarze nowych zielonych technologii do wykorzystania w przemyśle kosmetycznym i chemii gospodarczej. W badaniach zastosowano komplementarny zestaw technik analitycznych, procesowych, toksykologicznych i aplikacyjnych. Charakterystykę składu chemicznego oraz porównywanie profili surowców i otrzymanych preparatów prowadzono z wykorzystaniem GC-MS. Profil bezpieczeństwa preparatów obejmował badania cytotoksyczności, genotoksyczności, mutagenności oraz korozji skóry. Właściwości użytkowe oceniano z wykorzystaniem znormalizowanych metod mikrobiologicznych oraz innych modeli aplikacyjnych, takich jak scratch assay, badania okluzji i przenikania substancji aktywnych w strukturę włosa, badania toksyczności wobec patogenów roślinnych.

Podziękowania: Przedstawienie wyników Zespołu Wrocław Tech Fragrance Lab jest możliwe dzięki wsparciu w ramach programu *Academia Professorum Iuniorum* na Politechnice Wrocławskiej.

Literatura:

1. Arslan D, Tang R, Bouldin R, Mosurkal R, Sun Y, Orbey N; Investigation of the Synergistic Effect of Combined Antimicrobial Agents and Insect Repellent Microcapsules on Fabrics. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2025**, 64, 8202-8210
2. European Parliament and Council. Regulation (EU) No 528/2012 concerning the making available on the market and use of biocidal products. Consolidated version: 15 June 2026. EUR-Lex. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:02012R0528-20260615>
3. European Parliament and Council. Regulation (EC) No 1223/2009 on cosmetic products. Consolidated version: 1 May 2026. EUR-Lex. <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=CELEX:02009R1223-20260501>
4. Wang X, Li J, Hu X, Chen Y, Li C, Cui Z. A comparative life cycle assessment of novel technologies: extraction of essential oils from rosemary leaves. *Sustain Prod Consum.* **2025**, 56, 328-342



S06 WS22

BioMethane Digital Ecosystem

Każda cząsteczka ma znaczenie

Urszula Kiełkowska¹, Sławomir Łazarski², Anna Piekut², Marcin Cichosz¹

¹ Katedra Technologii Chemicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
ul. Gagarina 7; 87 – 100 Toruń

² ORLEN Biometan Sp. z o.o., ul. M. Kasprzaka 25, 01-224 Warszawa
ulak@umk.pl

Celem projektu jest opracowanie i demonstracja cyfrowego bliźniaka w instalacjach biogazowych i biometanowych, obejmującego cały łańcuch technologiczny. Instalacje tego typu, wyposażone są w zintegrowany moduł produkcji BioLNG. Koncepcja projektu wykorzystuje światowe doświadczenia eksploatacyjne związane ze wzbogacaniem biogazu za pomocą płuczek wodnych, absorpcji chemicznej i fizycznej, adsorpcji zmiennociśnieniowej (PSA), separacji membranowej oraz procesów kriogenicznych. Coraz większe znaczenie uzyskują układy membranowe oraz konfiguracje hybrydowe, umożliwiające osiągnięcie wysokiej czystości produktu i ograniczenie strat metanu, podczas gdy technologie kriogeniczne są szczególnie uzasadnione w instalacjach zintegrowanych z produkcją skroplonego biometanu i odzyskiem bioCO₂. Cyfrowego bliźniaka można zbudować jako hybrydowy model łączący bilanse masowe i energetyczne, modele równowagowe i kinetyczne, dane historyczne oraz algorytmy uczenia maszynowego. Dane procesowe pozyskiwane w czasie rzeczywistym obejmują parametry fermentacji, skład i przepływ biogazu, stężenia CH₄, CO₂, H₂S, O₂ i H₂O, ciśnienia i temperatury kolejnych stopni separacji, zużycie energii, stan modułów membranowych lub adsorpcyjnych, jakość biometanu oraz parametry procesu skraplania. System prognozuje jakość biogazu surowego i biometanu, wykrywa pogorszenie właściwości materiałów separacyjnych, identyfikuje nieszczelności oraz wyznacza optymalne nastawy instalacji. Wielokryterialna optymalizacja obejmuje jednocześnie maksymalizację odzysku CH₄ i produkcji BioLNG, minimalizację zużycia energii, kosztów eksploatacyjnych oraz emisji gazów cieplarnianych, a także wielkości strumienia metanu traconego wraz z gazem resztkowym. Ograniczenie emisji nieorganicznych jest kluczowym warunkiem zachowania wysokiej efektywności klimatycznej biometanu, ponieważ uwolnienia występujące podczas fermentacji, wzbogacania, magazynowania i obsługi pofermentu mogą istotnie zwiększać ślad węglowy całego łańcucha technologicznego. Rezultatem projektu będzie predykcyjny system wspomagania decyzji, umożliwiający dobór parametrów fermentacji, technologii oczyszczania i warunków skraplania do aktualnej jakości substratów oraz biogazu. Opracowane rozwiązanie stworzy podstawę do autonomicznego sterowania biometanownią, predykcyjnego utrzymania ruchu, odzysku bioCO₂ oraz wiarygodnego obliczania jednostkowego śladu węglowego BioLNG. Projekt wpisuje się w założenia zielonych technologii, gospodarki o obiegu zamkniętym i dekarbonizacji transportu ciężkiego, łącząc produkcję odnawialnego paliwa z inteligentnym zarządzaniem zasobami oraz minimalizacją strat środowiskowych.



S06 WS23



Komunikaty sekcyjne

Energetyka przyszłości: odnawialna, ekologiczna, konieczna - możliwa!

Wiesław Łasocha

Wydział Chemii UJ, Gronostajowa 2, 30-387 Kraków

e-mail lasocha@chemia.uj.edu.pl

Mieszkamy w kraju nie posiadającym pokaźnych zasobów ropy naftowej czy gazu. Nie mamy też dużych zasobów rud pierwiastków rozszczepialnych (które też kiedyś ulegną wyczerpaniu). Synteza termojądrowa to sprawa przyszłości, z uwagi na poważne problemy techniczne i surowcowe. Mamy też świadomość iż paliwa kopalne kiedyś, tzn. niezadługo, ulegną wyczerpaniu; stąd też 'opłaty za emisję CO₂' to raczej forma drenowania kieszeni podatnika. A indywidualne magazyny energii przypominają pomysły przewodniczącego Mao by każdy chińczyk, w przydomowej dymarce wytapiał żelazo. Nawet przy niskiej wydajności miliard ludzi powinien wyprodukować więcej żelaza niż USA, wykazując tym wyższość komunistycznej gospodarki i jej miejsce w świecie! Musimy też pamiętać że brak surowców wymusi zastąpienie 'kryterium/bożka opłacalności' wymogiem zapewnienia 'minimum energii dla produkcji żywności i egzystencji społeczeństw'.

Chemia, dzięki której Ziemia jest w stanie wyżywić, ubrać, leczyć miliardy mieszkańców **jest w stanie rozwiązać problemy z wytwarzaniem niezbędnej dla nich energii** w sposób w miarę ekologiczny, bazując na efektach cieplnych reakcji chemicznych.

'Energetyka przyszłości' będzie się opierać na odnawialnych źródłach energii OZE, oraz na odtwarzalnym '**materiale**' będącym nośnikiem i depozytariuszem energii (odpowiednik paliw kopalnych). Dla zastosowań energetycznych **material** będzie dystrybuowany w stanie wolnym, uzyskanie energii będzie związane z jego egzoenergetycznym utlenianiem. Cała energia nadmiarowa ze źródeł OZE będzie magazynowana poprzez endoenergetyczny proces redukcji tlenków do wolnych pierwiastków. Każdy dach może i powinien produkować energię!

Idealny kandydat na **material**, nośnik energii 'przyszłości' powinien być:

- tani, łatwo dostępny w dużych ilościach
- nietoksyczny, zarówno materiał w stanie wolnym jak i jego proste związki
- bezpieczny, nie wymagający drogich, ciężkich osłon, super wytrzymałych naczyń
- łatwy w transporcie, umożliwiającą tanie i bezpieczne długie przechowywanie i transport
- procesy przemian pomiędzy 'formami' użytkowymi w energetyce powinna być 'przyjazne środowisku', dobrze zbadane, kontrolowalne, szybkie, ekonomicznie rozsądne, gęstość zmagazynowanej energii powinna być duża.

Do niedawna faworytem w kategorii materiał energetyki przyszłości był wodór. Jednakże jego transport i magazynowanie jest bardzo kłopotliwe. Być może nie uda się znaleźć jednego **materialu** zastępującego paliwa kopalne, i będą stosowane różne **materiały** w dużych instalacjach energetycznych, a inne w samolotach, pojazdach wojskowych czy małych silnikach.

Najbardziej obiecującym, z rozważanych materiałów, są lekkie pierwiastki z grupy metali (Na, Mg, Al., Fe, Zn) i metaloidów (Si) [1]. Naszym faworytem jest stare i poczciwe żelazo, któremu tyle zawdzięczamy! Co więcej proszki żelazowe mogą być spalane w zmodernizowanych elektrowniach węglowych. Nie wszystkie problemy są już rozwiązane, więc wszystkie ręce na pokład, bo warto!

Co ważne wiele krajów UE do roku 2050 zamierza zmodernizować przynajmniej część swoich elektrowni węglowych do zasilania drobnokrystalicznym żelazem [2]. Polska nie! Szkoda, nasza energetyka stoi węglem, mamy kadry i infrastrukturę. Transformacja energetyczna i dekarbonizacja nie musi generować bezrobocia w rejonach elektrowni węglowych. Mamy też rzeszę młodych zdolnych chemików. Świat rusza ku nowym rozwiązaniom, a my, 20-sta gospodarka świata, decydujemy się 'stać w ogonie Europy'.

Nasze badania (literaturowe i eksperymentalne), dotyczą możliwości zastąpienia w makroskali paliw kopalnych paliwem chemicznym. Badania eksperymentalne, są skoncentrowane na; nano-, mikro-, oraz 'aglomeratach mikrometrycznych ziaren' wybranych metali w formie litej jak i gąbczastej (głównie Fe). Nasze testy dotyczą zmian w kolejnych procesach utlenienia i redukcji: morfologii (SEM), powierzchni właściwej (BET) i wielkości ziaren (xrpD, metoda Scherrer'a, Wiliamsen-Hall'a), efektów cieplnych w funkcji składu atmosfery procesu (DTA, xrpD vs. temp.).

Literatura

1. Enabling the metal fuel economy: green recycling of metal fuels, P. Julien and J.M. Bergthorson, Sustainable Energy Fuels, 2017, 1, 615
2. A new iron age? The potential role of iron fuel in Europe's clean energy transition, J. Schuler, A. Ardane, V. Slednev, W. Fichtner, Chem Circularity (2026), <https://doi.org/10.1016/j.checir.2026.100047>



S06 KS02

Przetwarzanie odpadów cukrowniczych metodami chemiczno-biologicznymi w modelu gospodarki cyrkularnej

Michał J. Binczarski, Ewa Wiktorowska-Sowa, Aleksandra Pawlaczyk, Małgorzata I. Szynkowska-Jóźwik, Izabela. A. Witońska

*Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej
90-543 Łódź, ul. Żeromskiego 114
e-mail: michal.binczarski@p.lodz.pl*

Przemysł cukrowniczy charakteryzuje się przetwarzaniem ogromnych ilości biomasy w krótkim okresie czasu (średni czas trwania kampanii to ok 100 dni), generując tym samym duże ilości odpadów. W kampanii cukrowniczej 2024/2025 w Polsce, wyprodukowano ok. 2,6 mln ton cukru, przerabiając 18,4 mln ton buraków cukrowych, z czym wiązało się wytworzenie produktów odpadowych w ilościach: 9,2 mln ton wysłodków mokrych, 12,9 mln ton liści, 1,8 mln ton główek, 0,9 mln ton wapna defekosaturacyjnego i 0,64 mln ton melasu. Realizowane w latach 2012-2023 z partnerem przemysłowym projekty NCBiR pozwoliły na wskazanie potencjalnych strumieni odpadów cukrowniczych możliwych do przetworzenia w produkty chemiczne i energetyczne o znaczeniu gospodarczym. Wykazano, że możliwe jest przetwarzanie biomasy lignocelulozowej wysłodków i liści buraczanych w furfural, glikol propylenowy, butanol i inne komercyjne produkty chemiczne w skojarzonych procesach biologiczno-chemicznych [1-5]. Hydrolizaty kwasowe wysłodków i liści buraczanych, dotowane melasem, stanowią również medium fermentacyjne dla konsorcjum mikroorganizmów ukierunkowanych na produkcję biogazu, a tym samym przyczynić się do redukcji śladu węglowego i poprawienia wydajności energetycznej cukrowni. Namnażanie wyselekcjonowanych szczepów drożdży i bakterii mlekowych pozwala, natomiast, na wzbogacanie pasz wysłodkowych w wysokowartościowe białko mikrobiologiczne [6]. W ramach projektów opracowano również innowacyjne metody suszenia wysłodków buraczanych ciepłem odpadowym oraz granulacji wapna defekosaturacyjnego.

Wystąpienie stanowić będzie syntetyczne podsumowanie wypracowanych rozwiązań, ze szczególnym uwzględnieniem tematu wytwarzania biogazu z hydrolizatów wysłodkowych (świeżych wysłodków, wysłodków kiszonych oraz wysłodków suszonych).

Literatura:

- [1] M. Modelska, *Molecules* (2017) 22, 1544
- [2] J. Tomaszewska, *RSC Adv.* (2018) 8, 3161
- [3] B. Kolesinska, *Materials* (2019) 12/3, 350
- [4] Patent PL 227200 B1
- [5] Patent PL 240647 B1
- [6] Patent PL 431409 B1

Projektowanie ekologicznych kompozytów polimerowych o właściwościach wskaźnikowych i antybakteryjnych

Anna Marzec¹, Bolesław Szadkowski¹, Jacek Rogowski^{2†}, Magdalena Śliwka-Kaszyńska³

¹Instytut Technologii Polimerów i Barwników, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, ul. Stefanowskiego 16, 90-537 Łódź

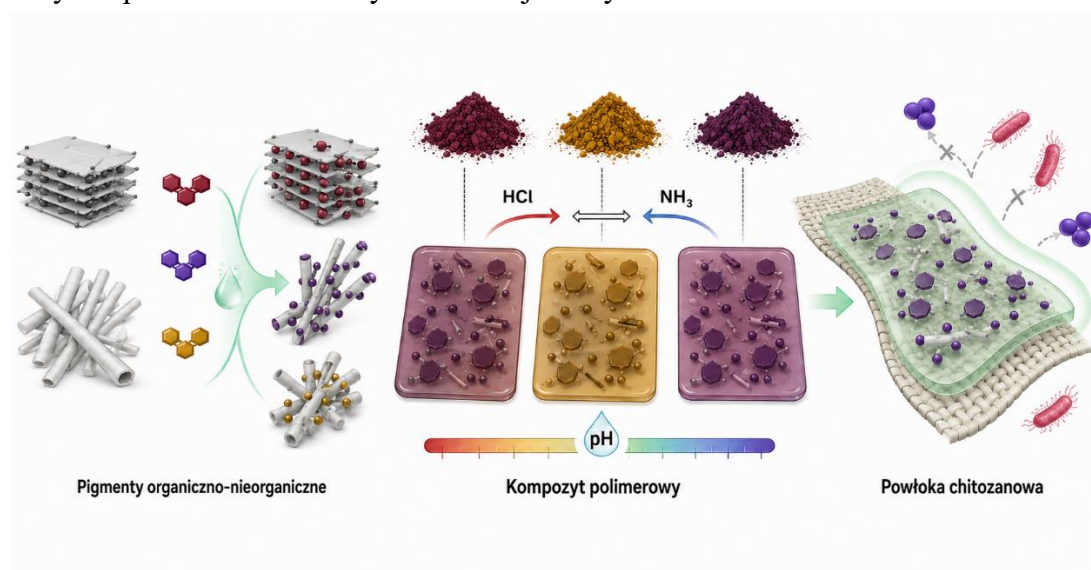
²Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, ul. Żeromskiego 114, 90-543 Łódź

³Katedra Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk
e-mail: anna.marzec@p.lodz.pl

Współczesne strategie projektowania materiałów polimerowych obejmują zastępowanie konwencjonalnych tworzyw układami biodegradowalnymi oraz stosowanie dodatków otrzymywanych z uwzględnieniem zasad zielonej chemii. Celem badań było opracowanie wielofunkcyjnych pigmentów organiczno-nieorganicznych oraz ocena ich przydatności w naturalnych i syntetycznych matrycach polimerowych: kopolimerze etylenowo-norbornenowym (COC), poli(kwasie mlekowym) (PLA) i chitozanie.

Dodatki hybrydowe otrzymywano w środowisku wodnym metodą strącaniową, immobilizując naturalne i syntetyczne chromofory na nośnikach mineralnych. Zastosowano barwniki antrachinonowe, w tym alizarynę i purpurynę, oraz pochodne azowe zawierające grupy hydroksylowe i/lub karboksylowe, zdolne do oddziaływań z jonami metali obecnymi w fazie nieorganicznej. Nośniki stanowiły palygorskit, wodorotlenki glinowo-magnezowe, haloizyt, wermikulit i sepiolit. Strukturę i właściwości układów analizowano metodami FTIR, ToF-SIMS, SEM, UV-Vis, TGA i PCFC oraz w testach mechanicznych i mikrobiologicznych. Immobilizacja zwiększała stabilność termiczną i chemiczną barwników oraz ograniczała ich migrację z matrycy.

Otrzymane układy zastosowano jako funkcjonalne napełniacze kompozytów COC i PLA oraz chitozanowych powłok nanoszonych na podłoża tekstylne. Materiały wykazywały stabilne wybarwienie, odpowiedź kolorymetryczną na zmiany pH środowiska, poprawione właściwości mechaniczne i ograniczoną palność. Powłoki chitozanowe nadawały tekstyliom aktywność przeciwbakteryjną wobec bakterii Gram-dodatnich i Gram-ujemnych, w tym *Staphylococcus aureus* i *Escherichia coli*. Wyniki wskazują na możliwość projektowania ekologicznych kompozytów łączących funkcje barwiące, sensoryczne, ochronne i biologicznie aktywne, przeznaczonych do inteligentnych opakowań oraz tekstyliów funkcjonalnych.





S06 KS04

Polimery pochodzenia roślinnego i włókna funkcjonalne w zrównoważonej bieliznie damskiej-aktualny stan badań i perspektywy rozwoju

Viktoria Paientko^{1,2}, Yulia Berger², Alla Kustovska³

¹ *Chuiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 17 Oleh Mudrak Str., Kyiv 03164, Ukraine*

² *RITWOTE LTD, 102 Herzl St., Rishon LeZion, Israel*

³ *Mykhailo Drahomanov State University, 9 Pyrohova St., Kyiv 01601, Ukraine*

yulia_berger@gmail.com

Rozwój zrównoważonych materiałów tekstylnych wymaga zastępowania lub ograniczania surowców kopalnych przy jednoczesnym zachowaniu właściwości wymaganych podczas użytkowania bielizny damskiej. Z punktu widzenia chemii materiałów szczególne znaczenie mają struktura chemiczna polimeru, masa cząsteczkowa, stopień krystaliczności, oddziaływania międzyłańcuchowe oraz właściwości powierzchniowe włókien. Parametry te bezpośrednio wpływają na sorpcję wody, właściwości mechaniczne, elastyczność i stabilność materiału.

Najbardziej rozwiniętą grupę stanowią materiały celulozowe. Celuloza, dzięki obecności grup hydroksylowych, tworzy rozbudowaną sieć wiązań wodorowych, co warunkuje jej właściwości mechaniczne i hydrofilowość. Włókna regenerowane, takie jak lyocell i modal, umożliwiają kontrolę morfologii i parametrów użytkowych przy wykorzystaniu odnawialnego surowca.

Istotne znaczenie mają również lignina, hemicelulozy, skrobia, pektyny oraz białka roślinne, które mogą być modyfikowane chemicznie i stosowane jako komponenty układów polimerowych. Lignina wyróżnia się strukturą aromatyczną oraz właściwościami antyoksydacyjnymi i UV.

Perspektywiczne są układy hybrydowe łączące polimery roślinne z innymi biopolimerami lub polimerami syntetycznymi. Umożliwia to regulację właściwości poprzez kontrolę kompatybilności faz, stopnia usieciowania oraz oddziaływań między komponentami. Nanoceluloza może pełnić rolę nanowypełniacza wzmacniającego dzięki dużej powierzchni właściwej i silnym oddziaływaniom międzyfazowym.

Głównym wyzwaniem pozostaje kompromis pomiędzy hydrofilowością a stabilnością mechaniczną. Zwiększenie zawartości komponentów roślinnych poprawia komfort użytkowania, ale może obniżać trwałość. Dlatego projektowanie materiałów powinno uwzględniać zależności pomiędzy strukturą chemiczną, morfologią i właściwościami powierzchni.

Kontrolowana modyfikacja powierzchni włókien oraz zastosowanie powłok polimerowych stanowią ważne narzędzia umożliwiające kształtowanie właściwości bez zmiany całej struktury materiału. Połączenie biopolimerów, nanocelulozy i inżynierii powierzchni może prowadzić do uzyskania trwałych i funkcjonalnych materiałów tekstylnych nowej generacji.



S06 KS05

SP-MWP-OES jako nowe narzędzie do analizy pojedynczych nanocząstek – wyzwania kalibracji i perspektywy zastosowań

Magdalena Borowska, Milena Adamczyk, Krzysztof Jankowski

*Katedra Chemii Analitycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska;
ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa;
magdalena.borowska@pw.edu.pl*

Nanotechnologia należy do najszybciej rozwijających się obszarów współczesnej nauki i przemysłu, co wiąże się z rosnącym zapotrzebowaniem na wiarygodne metody charakterystyki nanomateriałów. Jednym z kluczowych parametrów wykorzystywanych do identyfikacji i oceny jakości nanomateriałów jest rozmiar cząstek. Jego wyznaczenie pozostaje jednak wyzwaniem analitycznym i metrologicznym, zwłaszcza w przypadku nanoproszków oraz nanomateriałów o złożonym składzie chemicznym.

W pracy przedstawiono możliwości kalibracji techniki optycznej spektrometrii emisyjnej ze wzbudzeniem w plazmie mikrofalowej pracującej w trybie analizy pojedynczej cząstki (SP-MWP-OES), rozwijanej jako narzędzie do szybkiej i wielokierunkowej charakterystyki nanomateriałów. Technika ta umożliwia jednoczesne oznaczanie liczby cząstek, rozkładu ich wielkości oraz składu pierwiastkowego na poziomie pojedynczej nanocząstki dzięki rejestracji impulsów promieniowania emitowanych podczas atomizacji cząstek i wzbudzenia w plazmie mikrofalowej.

Omówiono różne strategie kalibracyjne opracowane z wykorzystaniem komercyjnie dostępnych materiałów odniesienia, jak i nanomateriałów otrzymanych w procesach syntezy laboratoryjnej, w tym nanocząstek złota. Przedstawiono ich przydatność do wyznaczania rozkładów wielkości nanocząstek oraz wskazano najważniejsze czynniki wpływające na poprawność uzyskiwanych wyników. Porównano metodę krzywej wzorcowej oraz metodę dodatku wzorca, wykazując przewagę drugiego podejścia podczas analizy próbek rzeczywistych oraz większą odporność na wpływ matrycy.

Zaproponowane podejście pokazuje, że odpowiednio opracowana kalibracja umożliwia wiarygodne oznaczanie rozmiaru pojedynczych nanocząstek przy jednoczesnym zachowaniu możliwości wielopierwiastkowej analizy ich składu chemicznego. Dzięki temu technika SP-MWP-OES może stanowić wartościowe narzędzie do charakterystyki nowoczesnych nanomateriałów stosowanych m.in. w biomedycynie, elektronice, materiałach funkcjonalnych, a także w kontroli jakości procesów ich syntezy i wytwarzania. Jednoczesna analiza sygnałów emisyjnych poszczególnych pierwiastków pozwala ponadto uzyskać informacje o stechiometrii pojedynczych cząstek, niejednorodności składu chemicznego oraz czystości materiału, co znacząco poszerza możliwości analityczne techniki SP-MWP-OES.

Weryfikacja składu napojów energetyzujących wzbogacanych adaptogenami z wykorzystaniem metod chromatografii cieczowej ze spektrometrią mas

Agnieszka Krzyszczak-Turczyn¹, Ilona Sadok¹, Paweł Kubica²,
Agnieszka Szopa², Katarzyna Czarnek³

¹ Katolicki Uniwersytet Lubelski Jana Pawła II, Wydział Medyczny, Instytut Nauk Biologicznych, Katedra Chemii Biomedycznej i Analitycznej, ul. Konstantynów 1J, 20-708 Lublin, e-mail:

agnieszka.krzyszczak@kul.pl, ilona.sadok@kul.pl

² Uniwersytet Jagielloński, Collegium Medicum, Wydział Farmaceutyczny, Katedra Biotechnologii Roślin i Grzybów Leczniczych, ul. Medyczna 9, 30-688 Kraków, e-mail: p.kubica@uj.edu.pl, a.szopa@uj.edu.pl

³ Katolicki Uniwersytet Lubelski Jana Pawła II, Wydział Medyczny, Instytut Nauk Medycznych, Katedra Podstawowych Nauk Medycznych, ul. Konstantynów 1H, 20-708 Lublin, e-mail: katarzyna.czarnek@kul.pl

Głównym celem spożycia napojów energetyzujących jest nie tylko ich atrakcyjność sensoryczna, lecz przede wszystkim dostarczenie kofeiny, odpowiedzialnej za zwiększenie poziomu energii i poprawę koncentracji. Na polskim rynku dostępne handlowo są również produkty wzbogacone ekstraktami z roślin adaptogennych, takimi jak: ekstrakty z korzeni żeń-szenia syberyjskiego (*Eleutherococcus senticosus*) oraz żeń-szenia koreańskiego (*Panax ginseng*). Wzbogacone napoje oprócz zawartości kofeiny przewyższającej 150 mg/L [1], powinny zawierać związki aktywne charakterystyczne dla poszczególnych roślin adaptogennych, będące markerami zastosowanych ekstraktów roślinnych. Do takich substancji należą ginsenozydy (m.in. Rg1 i Rb1) w przypadku *P. ginseng* oraz eleuterozydy (szczególnie E i B) dla *E. senticosus*.

Celem pracy była charakterystyka wybranych napojów energetyzujących uwzględniająca oznaczenie zawartości głównych ginsenozydów i eleuterozydów jako markerów obecności ekstraktów z surowców adaptogennych. Analizy przeprowadzono z wykorzystaniem ultrasprawnego chromatografu cieczowego z analizatorem mas typu potrójny kwadrupol ze źródłem jonizacji typu elektrorozpylanie. Akwizycję danych prowadzono w trybach dMRM (z ang. dynamic multiple reaction monitoring) lub SIM (z ang. selected ion monitoring), w dodatnim i ujemnym trybie jonizacji. Metody analityczne zoptymalizowano. Badaniom poddano cztery napoje energetyzujące: trzy produkty zawierające ekstrakt z *P. ginseng* w ilościach deklarowanych jako 0,08% (A), 0,0004% (B) oraz 0,2% (C; napój typu „shot”), a także jeden produkt (D; „shot”) zawierający ekstrakty z *E. senticosus* (0,4%) i *P. ginseng* (0,4%). Całkowite zawartości ginsenozydów w napojach energetyzujących A i B wynosiły odpowiednio 34,09 µg/L oraz 45,97 µg/L, co może wstępnie wskazywać na nieprawidłowości w stosunku do wartości wzbogacenia deklarowanego przez producenta, gdyż zgodnie z informacją na opakowaniach, napój A zawierał większą zawartość ekstraktu. Zawartości ginsenozydów w pozostałych produktach wynosiły 11,75 mg/L (C) oraz 382,39 mg/L (D), a eleuterozydów: 0,672 mg/L (D). Ilościowe oznaczanie ginsenozydów i eleuterozydów z wykorzystaniem techniki chromatografii cieczowej sprzężonej ze spektrometrią mas stanowi skuteczne narzędzie wstępnej kontroli jakości napojów energetyzujących wzbogacanych ekstraktami z roślin adaptogennych oraz pozwala na weryfikację zgodności deklaracji producenta z rzeczywistym składem produktu.

Podziękowanie: Praca naukowa finansowana w ramach zadania zleconego przez Ministra Nauki pt: „Badanie wpływu stosowania napojów energetyzujących i wybranych adaptogenów roślinnych na zdrowie i stan psychiczny młodych dorosłych – projekt badawczy” zgodnie z umową nr MEiN/2023/DPI/3004.



S06 KS07

Dobór warunków chromatograficznych do oznaczania organicznych filtrów UV techniką UHPLC-DAD

Łukasz Nuckowski¹, Sylwia Studzińska²

¹Katedra Oceanografii Chemicznej i Geologii Morza, Wydział Oceanografii i Geografii, Uniwersytet Gdański, al. Marszałka Piłsudskiego 46, 81-378 Gdynia;

²Katedra Chemii Środowiska i Bioanalityki, Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu
ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń
e-mail: lukasz.nuckowski@ug.edu.pl

Organiczne filtry promieniowania ultrafioletowego (OFUV) są szeroko stosowane jako aktywne składniki kremów do opalania oraz wielu kosmetyków codziennego użytku. Produkty fotoochronne stosowane na skórę chronią przed oparzeniami słonecznymi, ograniczają proces fotostarzenia, uszkodzenia DNA oraz zmniejszają ryzyko raka skóry. Niestety, to, co chroni ludzkie zdrowie, może również negatywnie wpływać na środowisko morskie. Coraz częstsze wykrywanie OFUV w abiotycznych i biotycznych elementach środowiska, a także doniesienia o negatywnym wpływie na organizmy wodne, budzą uzasadnione obawy dotyczące ich potencjalnego wpływu na środowisko.

Dostarczenie wiarygodnych danych dotyczących występowania OFUV oraz ich produktów przemian wymaga opracowania selektywnych i niezawodnych metod analitycznych. Ze względu na ich wspólne źródło emisji do środowiska, pożądane jest jednoczesne oznaczanie wielu związków. Jednocześnie znaczne różnicowanie ich budowy chemicznej i właściwości fizykochemicznych sprawia, że równoczesne rozdzielenie chromatograficzne stanowi istotne wyzwanie.

Głównym celem badań było opracowanie metody jednoczesnego oznaczania 13 wybranych OFUV powszechnie stosowanych w kosmetykach fotoochronnych z wykorzystaniem ultra wysokosprawnej chromatografii cieczowej z detektorem z matrycą diodową (UHPLC-DAD). W celu doboru warunków rozdzielenia przeprowadzono badania z wykorzystaniem trzech faz stacjonarnych (oktadecylowej, fenyloheksylowej i pentafluorofenylopropylowej) oraz dwóch modyfikatorów organicznych fazy ruchomej (metanolu i acetonitrylu). Dla każdego układu chromatograficznego analizowano wpływ zawartości modyfikatora organicznego w fazie ruchomej na retencję poszczególnych analitów w warunkach izokratycznych.

Najlepszą selektywność rozdzielenia uzyskano dla kolumny oktadecylowej z metanolem jako modyfikatorem organicznym fazy ruchomej. Na podstawie uzyskanych wyników opracowano program elucji gradientowej umożliwiający całkowite rozdzielenie wszystkich 13 analizowanych OFUV. Prezentowana metoda stanowi narzędzie do oznaczania tych związków w próbkach środowiskowych oraz punkt wyjścia dalszego rozwoju metod przygotowania i analizy tego typu próbek.



S06 KS08

Pojęcie temperatury równoważnej jako nowego parametru w transporcie uwodnionych jonów w fazie gazowej

Izabela Paulina Wolańska, Edyta Budzyńska, Jarosław Puton

Wydział Nowych Technologii i Chemii, Wojskowa Akademia Techniczna
izabela.wolanska@wat.edu.pl

Głównym obszarem zastosowań spektrometrii ruchliwości jonów (IMS) jest analityka chemiczna. Technika ta znajduje zastosowanie w wielu dziedzinach chemii i biochemii, a także w medycynie oraz badaniach środowiskowych. Badania prowadzone z wykorzystaniem detektorów IMS mogą dostarczyć cennych informacji na temat procesów tworzenia jonów oraz ich transportu w gazach. Opis ruchu jonów jest zagadnieniem złożonym ze względu na wiele aspektów, które należy uwzględnić, w tym procesów tworzenia i rozpadu klastrow zachodzących podczas przemieszczania się jonów w fazie gazowej. Parametry termodynamiczne tych procesów mają istotny wpływ na ruchliwość jonów wyznaczaną na podstawie szybkości ich ruchu w fazie gazowej, w warunkach pola elektrycznego.

Mechanizm transportu jonów jest jednym z kluczowych czynników wpływających na właściwości analityczne detektorów stosowanych w IMS. Za pomocą dwóch z nich, spektrometru ruchliwości jonów z komorą dryftową (DT IMS) oraz różnicowego spektrometru ruchliwości jonów (DMS), zbadano właściwości transportowe prostych jonów halogenkowych w kontrolowanych warunkach wilgotności i temperatury. Celem badań było porównanie wpływu temperatury oraz natężenia pola elektrycznego na właściwości transportowe uwodnionych jonów chlorkowych, bromkowych i jodkowych.

Podstawowe eksperymenty przeprowadzone z wykorzystaniem DT IMS polegały na wyznaczeniu czasów dryftu jonów Cl^- , Br^- i I^- dla kilku temperatur oraz różnych stężeń pary wodnej. Badania przeprowadzone z wykorzystaniem DMS polegały natomiast na analizie różnicowych widm ruchliwości jonów halogenkowych przy różnych wilgotnościach. W literaturze podejmowano próby porównania efektywności obu technik w analizie związków halogenowanych, jednak zagadnienie to nie zostało dotychczas rozpatrzone w kontekście dynamicznych zmian stopnia uwodnienia jonów oraz ich wpływu na obserwowaną ruchliwość. Zaproponowana przez nas metodyka opierała się na porównaniu względnych zmian ruchliwości zredukowanych wyznaczonych za pomocą DT IMS oraz DMS. Takie podejście umożliwiło zdefiniowanie nowego parametru - temperatury równoważnej. Odpowiada ona temperaturze gazu w DT IMS, dla której obserwowana zmiana ruchliwości zredukowanej jest równoważna zmianie uzyskanej w DMS przy określonej wartości natężenia pola elektrycznego. Dodatkowym rezultatem jest możliwość wyznaczania zależności ruchliwości zredukowanej od zredukowanego natężenia pola elektrycznego z wykorzystaniem temperatury równoważnej, co stanowi prostą metodę ilościowej interpretacji wyników uzyskiwanych metodą DMS.

Praca została sfinansowana przez Wojskową Akademię Techniczną w ramach projektu badawczego UGB 531-000092-W900-22.



S06 KS09

Antyszkła tellurynowe jako nowej klasy materiały luminescencyjne

Łukasz Zalewski, Marcin Sobczyk

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii;
F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław;
338934@student.uwr.edu.pl

Antyszkła stanowią nową klasę materiałów nieuporządkowanych, charakteryzujących się zachowaniem dalekozasięgowego porządku anionowego przy jednoczesnym nieuporządkowaniu podsięci kationowej. Taka specyficzna struktura sprawia, że materiały te wykazują właściwości pośrednie pomiędzy klasycznymi szklami i kryształami, otwierając nowe możliwości ich zastosowania jako matrycy dla jonów lantanowców.

W prezentacji przedstawione zostaną wyniki badań antyszkieł tellurynowych $\text{Bi}_2\text{Te}_4\text{O}_{11}$ domieszkowanych jonami Nd^{3+} oraz Ho^{3+} , otrzymanych trzema niezależnymi metodami syntezy: reakcją w fazie stałej pomiędzy tlenkami oraz dwiema procedurami opartymi na kontrolowanej krystalizacji szkła. Wykazano, że wszystkie zastosowane metody prowadzą do otrzymania jednofazowego materiału $\text{Bi}_2\text{Te}_4\text{O}_{11}$ o wysokiej czystości.

Szczególną uwagę poświęcono wpływowi lokalnego otoczenia jonów aktywnych na ich właściwości spektroskopowe. W porównaniu z klasycznymi szklami tellurynowymi antyszkła wykazują wyraźny wzrost przekrojów czynnych na absorpcję dla przejść wewnątrzkonfiguracyjnych f-f jonów Nd^{3+} i Ho^{3+} , co wskazuje na korzystniejsze oddziaływanie lokalnego otoczenia na jony domieszek oraz zwiększa ich potencjał aplikacyjny w fotonice. Przedstawione zostaną również właściwości luminescencyjne badanych materiałów, obejmujące widma emisji oraz kinetykę zaniku luminescencji.

Dodatkowo wykazano, że w przypadku antyszkieł $\text{Nd}^{3+}:\text{Bi}_2\text{Te}_4\text{O}_{11}$ wybór metody syntezy nie wpływa w istotny sposób na właściwości luminescencyjne materiału, co świadczy o wysokiej powtarzalności otrzymywanego środowiska optycznie aktywnych jonów i potwierdza uniwersalność opracowanych procedur syntezy. Uzyskane wyniki wskazują, że antyszkła tellurynowe mogą stanowić obiecującą grupę materiałów luminescencyjnych, łączących zalety szkieł i kryształów oraz otwierających nowe perspektywy dla zastosowań w optoelektronice i fotonice. Przedstawione wyniki należą do pierwszych systematycznych badań właściwości spektroskopowych jonów lantanowców w matrycach antyszklistych i wskazują na ich znaczący potencjał jako nowej generacji materiałów aktywnych optycznie.



S06 KS10

Wykorzystanie informacji o składzie opakowań papierowych w ocenie zgodności deklarowanego źródła pochodzenia z zastosowaniem technik LA-ICP-MS i LIBS

Aleksandra Pawlaczyk, Małgorzata I. Szyrkowska-Jóźwik

*Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka;
ul. Żeromskiego 114, 90543 Łódź;
aleksandra.pawlaczyk@p.lodz.pl*

Podrabianie produktów stanowi problem o zasięgu globalnym, powodujący straty gospodarcze, naruszający prawa własności intelektualnej, a w przypadku wielu kategorii produktów stwarzający również potencjalne zagrożenie dla zdrowia i bezpieczeństwa konsumentów. Według raportu OECD i EUIPO wartość światowego handlu towarami podrzobionymi i pirackimi w 2021r. oszacowano na około 467 mld USD, co odpowiadało 2,3% globalnego importu, natomiast w przypadku Unii Europejskiej udział takich produktów wynosił 4,7% całkowitego importu. Problem obejmuje bardzo różne grupy produktów, od dóbr luksusowych i odzieży po produkty lecznicze, części samochodowe, żywność i kosmetyki. Szczególnie istotny w kontekście prezentowanych badań jest sektor kosmetyczny. Straty sprzedaży spowodowane podrabianiem kosmetyków na rynku Unii Europejskiej oszacowano na około 3 mld EUR, co odpowiada 4,8% całkowitej sprzedaży tego sektora [1]. Weryfikacja pochodzenia produktu może obejmować nie tylko ocenę samego produktu, ale również jego opakowania. Rozwój współczesnych technologii druku i wykończenia powierzchni umożliwia coraz dokładniejsze odwzorowanie wizualnych cech oryginalnych produktów, przez co identyfikacja różnic wyłącznie na podstawie oględzin może być niewystarczająca [2]. Opakowanie należy więc traktować nie tylko jako nośnik informacji wizualnej o produkcie i marce, lecz również jako złożony obiekt materiałowy, którego charakterystyka składu może dostarczać istotnych i komplementarnych informacji analitycznych.

Szczególnie interesujące w tym zakresie są techniki wykorzystujące oddziaływanie promieniowania laserowego z materiałem, umożliwiające bezpośrednie badanie próbek stałych przy ograniczonym zużyciu materiału [3]. Przydatność charakterystyki takich materiałów została wykazana m.in. przez Haase i współ. [4], do klasyfikacji kartonowych opakowań farmaceutycznych reprezentujących produkty autentyczne i podróbki z różnych źródeł.

Celem badań była ocena możliwości wykorzystania składu pierwiastkowego papierowych opakowań produktów kosmetycznych do porównawczej oceny ich pochodzenia. Materiał badawczy obejmował opakowania różnych marek, z których do badań wybierano zarówno wewnętrzne podłoża papierowe, jak i odpowiadające im elementy zadrukowane o zróżnicowanej barwie i sposobie wykończenia powierzchni. Badania prowadzono z zastosowaniem technik LA-ICP-MS i LIBS, a uzyskane dane poddano analizie wielowymiarowej w celu oceny podobieństw i różnic pomiędzy badanymi materiałami oraz określenia znaczenia rodzaju badanego elementu opakowania dla uzyskiwanych relacji między próbkami. Obie techniki dostarczyły informacji pozwalających na różnicowanie badanych materiałów opakowaniowych, przy czym obserwowane relacje między próbkami zależały również od rodzaju badanego elementu. Wyniki wskazują, że uwzględnienie zarówno podłoża papierowego, jak i elementów zadrukowanych może dostarczać komplementarnych informacji w porównawczej ocenie opakowań i wspierać weryfikację ich pochodzenia.

[1] OECD/EUIPO (2025). *Illicit Trade*, OECD Publishing, Paris.

[2] Dégardin, K. i współ. (2018). *Forensic Science International*, **291**, 144–157.

[3] Russo, R.E. i współ. (2013). *Analytical Chemistry*, **85**(13), 6162-6177.

[4] Haase, E. i współ. (2020). *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, **172**, 105963.



S06 KS11

Wielometodowa identyfikacja nowych substancji psychoaktywnych z grupy syntetycznych katynonów w praktyce opiniodawstwa sądowego od reakcji klasycznych po GC-MS i FT-IR

Anna Pietrasz

*Państwowa Akademia Nauk Stosowanych w Krośnie;
ul. Dmochowskiego 12, 38-400 Krosno;
e-mail: anna.pietrasz@pans.krosno.pl*

Nowe substancje psychoaktywne (NSP), a wśród nich syntetyczne katynony, stanowią jedno z największych wyzwań współczesnej chemii sądowej. Pojawiają się na rynku szybciej, niż powstają dla nich certyfikowane wzorce analityczne, dane farmakologiczne oraz regulacje prawne. W pracy przedstawiono wielometodową ścieżkę identyfikacji przedstawiciela tej grupy N-etylo-nor-pentadronu (NEP) realizowaną w praktyce opiniodawstwa sądowego.

Materiał badany stanowiła krystaliczna substancja koloru białego, zabezpieczona w postępowaniu przygotowawczym. Zastosowano sekwencyjną procedurę analityczną obejmującą: badania organoleptyczne i krystalograficzną analizę mikroskopową (mikroskop fluorescencyjny z kontrastem fazowym oraz mikroskop świetlny, obserwacja w świetle spolaryzowanym), klasyczne reakcje barwne (odczynniki Marquisa, Fröhdego, Mandelina, Erdmanna i Vitaliego), chromatografię cienkowarstwową (TLC) i bibułową, a następnie potwierdzającą analizę instrumentalną metodami chromatografii gazowej sprzężonej ze spektrometrią mas (GC-MS) oraz spektroskopii w podczerwieni (FT-IR).

Kluczową obserwacją analityczną okazał się brak reakcji barwnej z odczynnikiem Marquisa. Wynik ten, pozornie negatywny, ma istotną wartość diagnostyczną: obecność grupy β -ketonowej w cząsteczce katynonu dezaktywuje pierścień aromatyczny wobec substytucji elektrofilowej, wskutek czego odczynniki oparte na stężonym kwasie siarkowym nie dają charakterystycznego zabarwienia, typowego dla amfetamin. Wynik ujemny pozwala zatem wykluczyć amfetaminę i metamfetaminę, kierując tok badań ku katynonom. Reakcje klasyczne nie różnicują jednak poszczególnych katynonów między sobą, jednoznaczna identyfikacja NEP była możliwa dopiero na podstawie zgodnych wyników GC-MS i FT-IR.

W drugiej części omówiono konsekwencje wyników analitycznych dla interpretacji toksykologiczno-sądowej. Wskazano na problem przeliczania masy zabezpieczonego materiału na liczbę porcji odurzających w sytuacji, gdy dla danej NSP brak jest ustalonej w orzecznictwie i piśmiennictwie wartości porcji handlowej. Przedyskutowano metodologiczne rozróżnienie dawki jednorazowej (aktywnej) od dawki dobowej, uwzględniającej zjawisko redozowania, oraz wykazano, że przyjęcie dawki dobowej jako jednostki przeliczeniowej prowadzi do zaniżenia liczby porcji. Podkreślono granicę kompetencji biegłego: ustalenie liczby porcji należy do analityka, natomiast kwalifikacja prawna ilości substancji pozostaje w gestii organu procesowego.

Klasyczne reakcje barwne oraz chromatografia planarna zachowują wartość jako metody przesiewowe i wykluczające, jednak identyfikacja rozstrzygająca NSP wymaga potwierdzenia technikami instrumentalnymi. Praca uwidacznia lukę między tempem pojawiania się nowych substancji psychoaktywnych a dostępnością danych farmakologicznych, wzorców analitycznych i ram prawnych, którą w praktyce wypełnia rzetelnie udokumentowana, wielometodowa procedura analityczna.

Słowa kluczowe: nowe substancje psychoaktywne, syntetyczne katynony, N-etylo-nor-pentadron, chemia sądowa, GC-MS, FT-IR, reakcje barwne

Literatura

- [1] Nunez-Montero, M., Perez-Mana, C., Hladun, O., Poyatos, L., Caicedo, D. A., De la Rosa, G., Argote, M. C., Martin, S., Ventura, M., La Maída, N., Di Trana, A., Graziano, S., Pichini, S., Farre, M., & Papaseit, E. (2025). Acute Pharmacological Effects of Two Synthetic Cathinones in Humans: An Observational Study of N-Ethylhexedrone and N-Ethyl-nor-pentadron. *Pharmaceuticals*, 18(5), 721.
- [2] Philp, M., & Fu, S. (2018). A review of chemical spot tests: A presumptive illicit drug identification technique. *Drug Testing and Analysis*, 10(1), 95-108.
- [3] O'Neal, C. L., Crouch, D. J., & Fatah, A. A. (2000). Validation of twelve chemical spot tests for the detection of drugs of abuse. *Forensic Science International*, 109(3), 189-201.
- [4] Duart-Castells, L., Nadal-Gratacos, N., Muralter, M., i in. (2021). Role of amino terminal substitutions in the pharmacological, rewarding and psychostimulant profiles of novel synthetic cathinones. *Neuropharmacology*, 186, 108475.



S06 KS12

Wykorzystanie cieczy głęboko eutektycznych do ekstrakcji pektyn

Dobrochna Rabiej-Kozioł¹, Aniela Milcarz²,

¹Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Wydział Chemii, Gagarina 7, 87-100 Toruń; d.rabiej@umk.pl

²University of Strathclyde, 16 Richmond St, Glasgow G1 1XQ, Wielka Brytania

Pektyny są naturalnymi polisacharydami występującymi w ścianach komórkowych roślin. Ze względu na właściwości zagęszczające, żelujące i stabilizujące znajdują szerokie zastosowanie w przemyśle spożywczym, kosmetycznym i farmaceutycznym. Ponadto pektyny uzyskane z wysłodków buraczanych charakteryzują się właściwościami emulgującymi, co umożliwia ich zastosowanie jako naturalnych emulgatorów.

Tradycyjnie pektyny otrzymuje się metodą ekstrakcji kwasowej prowadzonej w podwyższonej temperaturze. Jednakże ekstrakcja ta nie spełnia założeń zielonej chemii. Z tego powodu poszukuje się nowych rozwiązań obejmujących zarówno wykorzystanie metod niekonwencjonalnych, takich jak ekstrakcja wspomagana ultradźwiękami czy mikrofalowa, jak i nowych rozpuszczalników ekstrakcyjnych. W ostatnich latach jako alternatywę dla konwencjonalnych rozpuszczalników coraz częściej stosuje się cieczy głęboko eutektyczne (DES - Deep Eutectic Solvents), które są uznawane za przyjazne dla środowiska, mniej toksyczne oraz potencjalnie bardziej efektywne w procesach ekstrakcji.

Celem pracy było wyekstrahowanie pektyn z wysłodków buraczanych za pomocą DESów składających się z chlorku choliny jako akceptora wiązań wodorowych oraz kwasu cytrynowego lub kwasu mlekowego jako donorów wiązań wodorowych, zawierających 20, 30 i 40% wody. Powodzenie ekstrakcji oraz czystość otrzymanych pektyn potwierdzono metodą spektroskopii w podczerwieni z transformacją Fouriera z wykorzystaniem techniki osłabionego całkowitego wewnętrznego odbicia (FTIR-ATR). Następnie określono właściwości fizykochemiczne otrzymanych pektyn, obejmujące m.in. pH i stopień estryfikacji oraz ich właściwości funkcjonalne. Dodatkowo przeprowadzono konwencjonalną ekstrakcję z zastosowaniem kwasu mineralnego (kwasu solnego) jako metody referencyjnej.

Analiza widm FTIR-ATR potwierdziła otrzymanie pektyn z wysłodków buraczanych. Wydajność ekstrakcji z zastosowaniem DES-u (chlorek choliny:kwas mlekowy, zawierający 20% wody) była nieznacznie wyższa niż w przypadku konwencjonalnej ekstrakcji kwasem solnym. Natomiast ekstrakcja DESem chlorek choliny:kwas cytrynowy, wymagająca dodatkowego etapu oczyszczenia, cechowała się ponad trzykrotnie niższą wydajnością w porównaniu do pozostałych użytych ekstrahentów. Ponadto stwierdzono, że rodzaj zastosowanego ekstrahenta istotnie wpływał zarówno na właściwości fizykochemiczne, jak i funkcjonalne otrzymanych pektyn.



Sesja posterowa



S06 PS01

Projektowanie i synteza związków koordynacyjnych Ni(II), Co(II) i Rh(III/IV) jako układów katalitycznych w procesie (ko)polimeryzacji olefin

Kacper Pobłocki^{1,2}, Marzena Białek², Katarzyna Jarzemska³, Radosław Kamiński³, Łukasz Ponikiewski⁴, Dagmara Jacewicz¹

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

²Uniwersytet Opolski, Wydział Chemii i Farmacji, 45-052 Opole, ul. Oleska 48

³Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, 02-089 Warszawa, ul. Żwirki i Wigury 101

⁴Politechnika Gdańska, Wydział Chemii, 80-233 Gdańsk, ul. G. Narutowicza 11/12

e-mail: dagmara.jacewicz@ug.edu.pl

Rosnące znaczenie funkcjonalnych materiałów polimerowych powoduje wzrost zainteresowania nowymi układami katalitycznymi umożliwiającymi efektywną oligomeryzację i (ko)polimeryzację olefin oraz monomerów zawierających polarne grupy funkcyjne. Szczególną uwagę zwracają związki koordynacyjne na bazie jonów metali przejściowych, których aktywność i selektywność można kontrolować poprzez odpowiedni dobór ligandów oraz środowiska koordynacyjnego centrum metalicznego.

W prezentowanych badaniach otrzymano serię nowych związków koordynacyjnych niklu(II), kobaltu(II) oraz rodu(III/IV) zawierających ligandy karboksylanowe, pochodne pirydyny i 1,10-fenantroliny. Struktury krystaliczne otrzymanych kompleksów wyznaczono metodą monokrystalicznej dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego, a ich właściwości fizykochemiczne scharakteryzowano z wykorzystaniem metod konduktometrycznych i potencjometrycznych. Wyznaczone stałe trwałości umożliwiły ocenę wpływu rodzaju centrum metalicznego oraz efektu chelatowego na stabilność termodynamiczną badanych układów.

Nowo zsyntetyzowane związki koordynacyjne wykorzystano jako składniki układów katalitycznych w reakcjach oligomeryzacji akrylanu metylu oraz (ko)polimeryzacji α -olefin, w tym etylenu, heks-1-enu oraz okt-1-enu. Zaobserwowano istotny wpływ geometrii koordynacyjnej, rodzaju ligandów donorowych oraz zastosowanego kokatalizatora (MAO – metyloaluminoksanu, Et_2AlCl – chlorku dietyloglinu oraz EtAlCl_2 – dichlorku etyloglinu) na aktywność katalityczną badanych układów ($10^2 - 10^5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$). Uzyskane wyniki wskazują, że odpowiednie projektowanie otoczenia centrum metalicznego umożliwia kontrolowanie zarówno stabilności kompleksów, jak i ich właściwości katalitycznych.

Przedstawione badania dostarczają nowych informacji dotyczących zależności pomiędzy strukturą, trwałością i aktywnością katalityczną związków koordynacyjnych metali grup 8–11 układu okresowego oraz mogą stanowić podstawę do dalszego projektowania katalizatorów przeznaczonych do syntezy zaawansowanych materiałów polimerowych.

Podziękowania: Projekt finansowany ze środków Ministra Edukacji i Nauki w ramach Programu „Perły Nauki” nr. projektu PN/01/0137/2022.





S06 PS02

Uniwersalna, nieniszcząca metoda kontroli jakości regenerowalnych macierzy białkowych SPRi

Marcin Drozd, Sylwia Pniewska, Karolina Porycka, Mariusz Pietrzak, Elżbieta Malinowska

*Dział Diagnostyki Medycznej, Centrum Zaawansowanych Materiałów i Technologii CEZAMAT,
Politechnika Warszawska, ul. Poleczki 19, 02-822 Warszawa*

*Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny Politechniki Warszawskiej,
ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa*

e-mail: marcin.drozd.ch@pw.edu.pl

Regenerowalne macierze biosensorowe SPRi, wykorzystujące strategie immobilizacji oparte na „click-biologii” – w szczególności unieruchomienie poprzez kotwice DNA (ang. *DNA-directed immobilization*) oraz oddziaływanie kaptawidyna–biotyna – stanowią obiecującą platformę umożliwiającą wielokrotne wykorzystanie tego samego przetwornika. Kluczową zaletą takich układów jest duża elastyczność w doborze receptora, co umożliwia łatwą rekonfigurację macierzy biosensorowych i komponowanie dedykowanych paneli diagnostycznych obejmujących zarówno biomarkery ogólne, jak i specyficzne dla danej jednostki chorobowej. Praktyczne wykorzystanie platform do detekcji bezznacznikowej wiąże się z koniecznością weryfikacji poprawności ich przygotowania po etapie immobilizacji. Istotnym ograniczeniem pozostaje brak szybkich i nieniszczących metod kontroli jakości białkowych warstw receptorowych biosensorów SPRi przed przystąpieniem do właściwej analizy. Stosowane dotychczas podejścia są czasochłonne i trwale ingerują w strukturę warstwy, co wyklucza ich zastosowanie jako etapu wstępnej weryfikacji gęstości powierzchniowej receptorów unieruchomionych w polach testowych macierzy przeznaczonych do dalszych oznaczeń.

W niniejszej pracy zaprezentowano nieniszczącą metodę kontroli jakości warstw receptorowych, opartą na odwracalnym oddziaływaniu barwnik anionowy–białko, zaprojektowaną jako szybki etap przedpomiarowy. W ramach badań przeprowadzono dobór barwników oraz optymalizację warunków ich wiązania, co pozwoliło na uzyskanie wyraźnego sygnału analitycznego zależnego od gęstości powierzchniowej immobilizowanych bioreceptorów przy jednoczesnym zachowaniu pełnej odwracalności procesu i odzyskaniu pierwotnej funkcjonalności receptora. Wykazano, że sygnał generowany na etapie kontroli jakości bezpośrednio koreluje z ilością zimmobilizowanego białka wyznaczoną za pomocą klasycznego wariantu SPR, co pozwala na wiarygodne potwierdzenie poprawności przygotowania macierzy przed jej użyciem z właściwą próbką biologiczną. Opracowane podejście stanowi obiecującą strategię podnoszącą powtarzalność i niezawodność badań z użyciem rekonfigurowalnych biosensorów SPRi.



S06 PS03

Optimalizacja składu włóknistego i lokalna modyfikacja polimerowa materiałów tekstylnych do wyrobów o funkcji podtrzymującej

Viktoria Paientko^{1,2}, Yulia Berger²

¹ *Chuiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine, 17 Oleh Mudrak Str., Kyiv 03164, Ukraine*

² *RITWOTE LTD, 102 Herzl St., Rishon LeZion, Israel*
yulia_berger@gmail.com, payentkovv@gmail.com

Rosnące wymagania stawiane nowoczesnym materiałom tekstylnym przeznaczonym do wyrobów o funkcji podtrzymującej wymagają opracowania rozwiązań zapewniających jednocześnie odpowiednią elastyczność, trwałość, stabilność wymiarową oraz komfort użytkowania. Jednym z najbardziej obiecujących kierunków rozwoju jest wykorzystanie lokalnej modyfikacji polimerowej, umożliwiającej kształtowanie właściwości mechanicznych materiału bez zmiany jego podstawowej struktury.

Celem pracy było opracowanie materiału tekstylnego o kontrolowanych właściwościach mechanicznych poprzez odpowiedni dobór składu włóknistego oraz zastosowanie miejscowej modyfikacji powierzchni włókien z wykorzystaniem wodnych dyspersji polimerowych. W badaniach zastosowano różne kombinacje włókien syntetycznych i naturalnych, pozwalające uzyskać materiały o zróżnicowanych właściwościach użytkowych.

Przeprowadzona analiza wykazała, że właściwy dobór udziału poszczególnych włókien oraz sposób nanoszenia powłok polimerowych mają istotny wpływ na zachowanie materiału podczas odkształceń oraz jego trwałość eksploatacyjną. Szczególnie korzystne okazało się miejscowe wzmacnianie wybranych obszarów materiału, które umożliwia uzyskanie stref o różnej sztywności i elastyczności przy zachowaniu wysokiego komfortu użytkowania.

Zastosowanie wodnych dyspersji polimerowych pozwala na precyzyjne kształtowanie właściwości powierzchniowych materiałów tekstylnych oraz poprawę ich parametrów użytkowych bez znacznego zwiększenia masy wyrobu. Rozwiązanie to jest zgodne z aktualnymi kierunkami rozwoju technologii tekstylnych, ukierunkowanymi na ograniczenie zużycia rozpuszczalników organicznych oraz zwiększenie efektywności procesów produkcyjnych.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że połączenie odpowiednio dobranego składu włóknistego z lokalną modyfikacją polimerową stanowi perspektywiczne rozwiązanie w projektowaniu nowoczesnych materiałów tekstylnych przeznaczonych do zastosowań medycznych, sportowych oraz wyrobów o funkcji podtrzymującej. Przedstawiona koncepcja może stanowić podstawę do dalszych badań nad materiałami o kontrolowanych właściwościach mechanicznych i wysokiej trwałości eksploatacyjnej.



S06 PS04

Analiza zawartości ^{210}Po i izotopów uranu w składnikach środowiska poeksploatacyjnego w Sudetach

Klaudia Lanczewska-Bejenka, Alicja Boryło, Bogdan Skwarzec

*Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk;
klaudia.lanczewska@ug.edu.pl*

W pracy przedstawiono wyniki analizy zawartości izotopów uranu oraz polonu w próbkach roślin i gleb pobranych z rejonu dawnej kopalni uranu w Kowarach (Sudety, Polska). Tereny pogórnice w Kowarach charakteryzują się podwyższonym potencjałem występowania naturalnych radionuklidów w środowisku, co związane jest z prowadzoną tam w przeszłości intensywną eksploatacją rud uranu. Pomimo że od zakończenia działalności górniczej minęło kilkadziesiąt lat, procesy migracji radionuklidów w środowisku, ich akumulacja w organizmach roślinnych oraz potencjalny wpływ na lokalne biocenozy pozostają istotnym przedmiotem badań. Analiza zawartości radionuklidów w komponentach środowiska jest kluczowa dla oceny stopnia skażenia, identyfikacji potencjalnych zagrożeń ekologicznych oraz planowania działań rekultywacyjnych i monitoringu radiologicznego.

Celem badań była ocena stopnia zanieczyszczenia środowiska naturalnego w rejonie dawnych wyrobisk uranowych oraz określenie możliwości bioakumulacji radionuklidów przez wybrane gatunki roślin występujące w ich bezpośrednim sąsiedztwie. Próbki roślinne i glebowe zostały pobrane w wybranych lokalizacjach zlokalizowanych w różnej odległości od historycznych miejsc eksploatacji. Materiał badawczy poddano odpowiedniemu przygotowaniu obejmującemu suszenie, mineralizację oraz radiochemiczną separację analizowanych izotopów. Oznaczenia wykonano metodą spektrometrii alfa.

Na podstawie uzyskanych widm alfa obliczono stężenia izotopów ^{210}Po , ^{234}U i ^{238}U w analizowanych próbkach oraz wyznaczono zakresy ich najwyższych i najniższych wartości. Dodatkowo oszacowano roczne dawki efektywne dla osób dorosłych wynikające z potencjalnej ekspozycji na badane radionuklidy. Uzyskane wyniki pozwalają na ocenę stopnia obecności naturalnych radionuklidów w środowisku pogórnym oraz wskazują na możliwość wykorzystania wybranych organizmów roślinnych jako bioindykatorów zanieczyszczenia radiologicznego.

Autorzy dziękują Ministerstwu Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wsparcie finansowe tej pracy poprzez dotację DS-531-T030-D745-26



S06 PS05

Świeże i konserwowane ryby i owoce morza jako źródło ^{210}Po w diecie ludzi

Klaudia Lanczewska-Bejenka, Alicja Boryło, Bogdan Skwarzec

*Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk;
klaudia.lanczewska@ug.edu.pl*

Głównym celem badań było oznaczenie stężeń izotopu ^{210}Po w przetworzonych produktach rybnych oraz świeżych rybach i mięczakach dostępnych na polskim rynku spożywczym oraz oszacowanie pochodzących od spożycia tych produktów efektywnych dawek promieniowania jonizującego.

Na podstawie otrzymanych wyników sprawdzono również, jaki wpływ na stężenia izotopu ^{210}Po miał rodzaj pakowania próbek (próżniowo lub w postaci konserw), rodzaj zalewy (woda, olej lub sos własny), jak również odpowiednie zabiegi utrwalania żywności, takie jak apertyzacja, sterylizacja czy pasteryzacja. Wśród analizowanych produktów rybnych największe stężenia ^{210}Po zmierzono w produktach przetworzonych, podczas gdy mniejsze wartości analizowanego radionuklidu charakteryzowały świeże ryby. Największe stężenie ^{210}Po w przetworzonej żywności pochodzenia rybnego i mięczakach zmierzono odpowiednio dla sardynki i ośmiornicy, najmniejsze zaś dla łososia jeziorowego i makreli. Największe stężenie ^{210}Po wśród świeżych ryb i mięczaków zmierzono dla miętusa nowozelandzkiego i omułka śródziemnomorskiego, najmniejsze natomiast dla pstrąga tęczowego oraz śledzia atlantyckiego. Średnie wartości rocznych dawek efektywnych związanych ze spożyciem świeżych i przetworzonych ryb oraz mięczaków dla izotopów ^{210}Po wśród dzieci w wieku od 1 do 2 lat wynoszą odpowiednio 0,600 $\mu\text{Sv}/\text{rok}$, wśród dzieci w wieku od 7 do 12 lat 0,353 $\mu\text{Sv}/\text{rok}$, z kolei wśród osób dorosłych 0,353 $\mu\text{Sv}/\text{rok}$. Otrzymane stężenia ^{210}Po w rybach bałtyckich oraz mięczakach i rybach przetworzonych oraz mięczakach różniły się statystycznie. Stwierdzono istotnie statystyczne różnice stężenia ^{210}Po w zależności od metody przechowywania ryb i mięczaków, natomiast nie stwierdzono statystycznie istotnych różnic dla otrzymanych stężeń ^{210}Po , biorąc pod uwagę kryterium rodzaju zalewy. Test post-hoc HSD wykazał istotne statystyczne różnice stężeń ^{210}Po między rybami pochodzącymi z konserw a rybami pakowanymi próżniowo, świeżo odłowionymi oraz pochodzącymi z akwakultur. Na jego podstawie wykazano również brak istotnych różnic statystycznych między rybami dzikimi i rybami pochodzącymi z akwakultur. Na podstawie analizowanych stężeń ^{210}Po stwierdzono, że największe oznaczone zawartości tego radionuklidu występowały w małżach, mięczakach z gromady głowonogi (kalmary, ośmiornice) oraz rybach dwustrefowych (sandacz, szczupak, okoń), które pozyskano z przybrzeżnych wód Morza Bałtyckiego i śledziu bałtyckim, który tylko na czas tarła wraca do wód przybrzeżnych i rzek.

Autorzy dziękują Ministerstwu Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wsparcie finansowe tej pracy poprzez dotację DS-531-T030-D745-26



S06 PS06

Ocena toksyczności laurylosiarczanu sodu i triclosanu *in vitro* w modelu *Danio* pręgowanego (*Zebrafish*)

Piotr Stachurski¹, Monika Rudkowska², Marta Waligórska³, Wojciech Świątkowski⁴,
Bogusława Łęska³

¹*Zakład Stomatologii Interwencyjnej Uniwersytet Medyczny w Lublinie*

²*Samodzielna Pracownia Badań Behawioralnych Uniwersytet Medyczny w Lublinie*

³*Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu*

⁴*Katedra i Klinika Chirurgii Szczękowo-Twarzowej Uniwersytet Medyczny w Lublinie*

Substancje powierzchniowo czynne oraz środki przeciwdrobnoustrojowe obecne w kosmetykach i produktach higieny osobistej stanowią istotną grupę zanieczyszczeń środowiska wodnego. Wśród nich szczególną uwagę zwracają laurylosiarczan sodu (SLS) i triclosan, których długotrwała obecność może wpływać na rozwój organizmów wodnych. Embriony *Danio rerio* są uznanym modelem eksperymentalnym umożliwiającym ocenę toksyczności rozwojowej oraz identyfikację wczesnych efektów działania badanych związków.

Celem badań była porównawcza ocena toksyczności SLS i triclosanu z wykorzystaniem modelu embrionalnego *Danio rerio*, ze szczególnym uwzględnieniem wpływu badanych substancji na przeżywalność, rozwój zarodkowy, czynność serca oraz aktywność lokomotoryczną larw.

Badania przeprowadzono zgodnie z wytycznymi testu ostrej toksyczności embrionalnej (Fish Embryo Acute Toxicity, FET, OECD 236). SLS wykazywał umiarkowaną toksyczność wobec embrionów *Danio rerio* ($LC_{50} = 2,654$ mM), powodując opóźnienie wylęgu oraz występowanie wad rozwojowych, takich jak skrzywienie osi ciała, deformacje ogona oraz obrzęk worka osierdziowego i żółtkowego. Nie stwierdzono natomiast istotnego wpływu na częstość pracy serca ani aktywność lokomotoryczną larw.

Triclosan wykazywał większą toksyczność niż SLS, prowadząc do obniżenia przeżywalności embrionów, zaburzeń rozwoju, zmniejszenia częstości akcji serca oraz ograniczenia aktywności lokomotorycznej larw. Oba badane związki wykazują toksyczność wobec rozwijających się embrionów *Danio rerio*, jednak triclosan charakteryzuje się wyższym potencjałem toksycznym niż SLS. Uzyskane wyniki potwierdzają wysoką przydatność modelu *Danio rerio* do przesiewowej oceny bezpieczeństwa składników produktów higieny osobistej oraz wskazują na potrzebę dalszych badań nad mechanizmami toksyczności związków powszechnie obecnych w środowisku wodnym.



S06 PS07

Bezpośrednia ekstrakcja biomasy roślinnej gliceryną jako zielona alternatywa dla przemysłu konsumenckiego

Łukasz Tabisz, Marta Waligórska, Zuzanna Piotrowicz, Bogusława Łęska

*Zakład Fizykochemii Środowiska, Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu;
Uniwersytetu Poznańskiego 8, Poznań, 61-614
bogunial@amu.edu.pl*

Typowe rozpuszczalniki wykorzystywane powszechnie w ekstrakcji związków organicznych z surowców roślinnych – woda i etanol – choć nietoksyczne i tanie, posiadają istotne wady. W przypadku wody jest to podatność ekstraktów na zakażenie mikrobiologiczne oraz ryzyko hydrolizy niektórych substancji. W przypadku etanolu jest to niestabilność ekstraktów, lotność rozpuszczalnika jak i brak jego biogodności. Wiele badań poświęconych jest poszukiwaniu nowoczesnych alternatyw dla tych rozpuszczalników, czego przykładami mogą być: dwutlenek węgla w stanie nadkrytycznym, ciecze jonowe, rozpuszczalniki głęboko eutektyczne.

Zadziwiającą dużą luką badawczą dotyczy jednak fizykochemii ekstraktów otrzymywanych z wykorzystaniem gliceryny – odnawialnego triolu, którego znaczna nadprodukcja wymusza pilne poszukiwanie nowych ścieżek jego zagospodarowania. Ze względu na nielotność, wysoką lepkość i (do niedawna) wysoką cenę czystego glicerolu, został on niemal całkowicie pominięty podczas opracowywania oryginalnych metodologii ekstrakcji wielu materiałów roślinnych wykorzystywanych w przemyśle kosmetycznym, spożywczym i farmaceutycznym. Przeprowadzone, dwuletnie badania, mające na celu wypełnienie tej luki, pokazały nie tylko efektywność ekstrakcji fitochemikaliów przez glicerynę – często znacznie przewyższającą tę dla wody i etanolu – ale też wybitną stabilność ekstraktów glicerynowych (zarówno chemiczną jak i mikrobiologiczną), ich korzystny profil użytkowy (lepsza stabilizacja układów emulsyjnych, całkowita nietoksyczność umożliwiającą ich wykorzystanie w produktach spożywczych), ale także pozwoliły rozwiązać szereg wątpliwości dotyczących pozornych przeszkód w wykorzystaniu tego triolu (wysokie straty ze względu na lepkość, niski odzysk ekstraktu, powolny proces ekstrakcji i separacji).

Podsumowanie fizykochemicznych aspektów bezpośredniej ekstrakcji biomasy gliceryną sugeruje wyraźnie, że ekologicznie oraz ekonomicznie jest to lepsza alternatywa – zarówno w stosunku do klasycznych, jak i tych bardziej nowoczesnych, “zielonych” rozpuszczalników.



S06 PS08

Efektywność procesu napowietrzania w usuwaniu zanieczyszczeń ze ścieków przemysłu rybnego

Patrycja Gensikowska, Justyna Miłek

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich
Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej
Zakład Inżynierii Chemicznej i Bioprosesowej
ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz
patgen000@pbs.edu.pl*

Przemysł przetwórstwa rybnego to jedna z najdynamiczniej rozwijających się gałęzi sektora spożywczego w Polsce. W ostatnich dwudziestu pięciu latach przychody ze sprzedaży produktów rybnych wzrosły prawie siedmiokrotnie [1]. Współcześni konsumenci są coraz bardziej świadomi wartości odżywczych ryb, które w porównaniu do mięsa zwierząt rzeźnych charakteryzują się wyższą zawartością magnezu i wapnia [2]. W zakładach przetwórstwa rybnego surowiec rybny poddawany jest wielu procesom technologicznym, takim jak filetowanie, wędzenie, zamrażanie, produkcja konserw rybnych czy marynat. Każdy z tych etapów wymaga użycia znacznych ilości wody, zarówno do mycia samych ryb, jak i oczyszczania maszyn oraz powierzchni produkcyjnych. W efekcie generowane są ścieki obciążone wysokim ładunkiem zanieczyszczeń. Ich objętość oraz skład w znacznym stopniu zależą od ilości wody użytej na danym etapie przetwórstwa oraz rodzaju przetwarzanego surowca [3].

Redukcja zanieczyszczeń w ściekach przetwórstwa rybnego stanowi ważny i aktualny temat badawczy głównie w aspekcie ochrony środowiska. Jedną z metod obniżenia ładunku zanieczyszczeń, w szczególności wskaźnika chemicznego zapotrzebowania na tlen (ChZT) jest napowietrzanie. Proces ten przyczynia się do zwiększenia stężenia rozpuszczonego tlenu, co w efekcie powoduje utlenianie materii organicznej do prostych związków mineralnych.

W pracy przedstawiono wyniki wpływu napowietrzenia na redukcję chemicznego zapotrzebowania na tlen (ChZT) w ściekach pochodzących z przetwórstwa rybnego. Oznaczenie ChZT w badanych próbkach ścieków wykonywano zgodnie z obowiązującą normą PN ISO 6060:2006 Jakość wody – Oznaczanie chemicznego zapotrzebowania tlenu. Badaniu zostały poddane próbki ścieków, przed i po wstępnym oczyszczeniu ścieków w zakładowej oczyszczalni ścieków. Probki ścieków zostały poddane napowietrzaniu przy zmiennym objętościowym natężeniu przepływu oraz zmiennym czasie. Dla ścieków pobranych przed wstępnym oczyszczeniem w zakładowej oczyszczalni, uzyskano stopień redukcji ChZT względem wartości początkowej w zakresie od 50 do 95%. Dla ścieku wstępnie oczyszczonego w zakładzie stopień redukcji analizowanego wskaźnika powyżej 80% uzyskano już po 1 h procesu napowietrzania.

Otrzymane wyniki badań dowodzą, że proces napowietrzania pozwala na efektywne obniżenie parametru ChZT, co w praktyce przekłada się na poprawę ekosystemu wodnego, do którego te ścieki są odprowadzane.

- [1] Zieziul J., Czapliński P., Funkcjonowanie przemysłu w warunkach niepewności-przykład przetwórstwa rybnego w Polsce. *Studies of the Industrial Geography Commission of the Polish Geographical Society/Prace Komisji Geografii Przemysłu Polskiego Towarzystwa Geograficznego* 2023, 37(1), 100-117.
- [2] Kapusta F., Ryby i ich przetwórstwo w Polsce na początku XXI wieku. *Nauki Inżynierskie i Technologie* 2014, 1 (12), 59-71.
- [3] Usydus Z., Szlinder-Richert J., Gospodarka wodno-ściekowo-osadowa w zakładach przemysłu rybnego dawniej i dziś. *Morski Instytut Badawczy-Państwowy Instytut Badawczy, Gdynia* 2021.



S06 PS09

Zielone technologie: parametry kinetyczne wybranych procesów biotransformacji z uwzględnieniem dezaktywacji stosowanych enzymów

Justyna Miłek

*Politechnika Bydgoska im. J.J. Śniadeckich
Zakład Inżynierii Chemicznej i Bioprosesowej, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,
ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz
e-mail jmilek@pbs.edu.pl*

W dobie zrównoważonego rozwoju odpady rolno-spożywcze przestają być traktowane wyłącznie jako problem środowiskowy, stając się cennym surowcem. Badacze zauważają, że odpady nie muszą być jedynie produktem odpadowym, lecz mogą stać się zasobem o istotnej wartości ekonomicznej [1]. Kluczowym narzędziem w przetwarzaniu różnorodnych frakcji biomasy i odpadów są enzymy [2]. Biorące udział w procesach biotransformacji enzymy; takie jak lipazy, inulinyazy i α -amylazy, są szeroko stosowane w przemyśle spożywczym i bioenergetycznym, często wykorzystując odpady agroprzemysłowe jako substraty. Ponieważ enzymy te są szczególnie wrażliwe na temperaturę, utrzymanie stabilności termicznej ma kluczowe znaczenie dla wydajności przemysłowej. Niniejsza praca przedstawia badania i analizy Miłek i in. [3–15] dotyczących wyznaczania optymalnej temperatury T_{opt} , energii aktywacji E_a i energii dezaktywacji E_d . W badaniu analizowano enzymatyczną hydrolizę lipidów przez lipazy z trzustki wieprzowej; hydrolizę inuliny przez endoinulinyazy i egzoinulinyazy; oraz hydrolizę skrobi przez α -amylazy *Bacillus*. Analiza uwzględniała kinetykę dezaktywacji enzymów, a optymalne temperatury ustalono na zakres 20–80°C. W oparciu o wyznaczone wartości T_{opt} i E_d obliczono stałe szybkości dezaktywacji k_d dla temperatur z zakresu 30–110°C.

Zatem, kontrolowanie warunków reakcji w celu zminimalizowania dezaktywacji jest kluczowe dla projektowania stabilnych biokatalizatorów i optymalizacji bioprosesów. Analiza wybranych procesów biotransformacji oraz wyznaczenie stałych kinetycznych pozwalają zaprojektować parametry pracy enzymatycznego reaktora membranowego. Dodatkowo, kontrolowana hydroliza enzymatyczna, stanowi obiecującą alternatywę dla klasycznych systemów osadu czynnego. Aspektem proekologicznym jest optymalizacja kinetyczna procesu, która pozwala nie tylko na redukcję kosztów związanych z dawkowaniem biokatalizatorów, ale również na wydłużenie żywotności stosowanych membran, tym samym ograniczając ślad węglowy całego procesu.

- [1] A. Ahenkan, E. Boon, E. Nordjo, B. Otchere-Ankrah, *J. Mater. Cycles Waste Manag.*, 2026.
- [2] S. Feng, W. Guo, A. Ding, S. M. Parsa, J. Pan, D. Cheng, T.V. Tung, H. H. Ngo, *Chem. Eng. J.*, 2025, 510, 161891.
- [3] J. Miłek, *Przem. Chem.*, 2020, 99, 446.
- [4] J. Miłek, *Adv. Biotechnol. Bioeng.*, 2021, 23, 25.
- [5] J. Miłek, *Przem. Chem.*, 2021, 100, 103.
- [6] J. Miłek, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2022, 147, 1371.
- [7] J. Miłek, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2022, 147, 8061.
- [8] J. Miłek, *Chem. Process Eng.*, 2020, 41, 229.
- [9] J. Miłek, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2023, 148, 859.
- [10] J. Miłek, *Przem. Chem.*, 2020, 99, 880.
- [11] J. Miłek, J. Lamkiewicz, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2022, 147, 14459.
- [12] J. Miłek, *Molecules*, 2021, 26, 4117.
- [13] J. Miłek, I. Grubecki, W. Tomczak, *Chem. Proc. Eng.*, 2024, **44**, e57.
- [14] J. Miłek, A. Ciaciuch, *J. Therm. Anal. Calorim.*, 2025, 150, 15183.
- [15] J. Miłek, J. Liszkowska, M. Wróblewski, *Catalysts*, 2026, 16, 281, 1.



S06 PS10

Analiza składu chemicznego i ocena potencjalnego zagrożenia dla człowieka i środowiska ze strony zużytych wyrzutni fajerwerków

Andrzej Żarczyński, Martyna Szelewa, Marta Smarzyk, Waldemar Maniukiewicz,
Jakub Kubicki, Wojciech M. Wolf, Małgorzata I. Szynkowska-Jóźwik

*Politechnika Łódzka, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej;
ul. Żeromskiego 114, 90-543 Łódź;
e-mail: andrzej.zarczyński@p.lodz.pl*

Fajerwerki stanowią powszechnie stosowany element oprawy wydarzeń okolicznościowych i uroczystości, jednak po ich użyciu powstają odpady mogące zawierać pozostałości substancji chemicznych oraz metali ciężkich. Zużyte wyrzutnie fajerwerków, pozostawiane często w przestrzeni publicznej, mogą stanowić potencjalne źródło zagrożenia dla zdrowia człowieka oraz środowiska naturalnego. Szczególnie istotna jest ocena obecności pierwiastków toksycznych oraz związków chemicznych wykorzystywanych w materiałach pirotechnicznych, które mogą przedostawać się do gleby i wód powierzchniowych [1-4].

Celem badań była analiza składu chemicznego odpadów po materiałach pirotechnicznych, ze szczególnym uwzględnieniem zawartości metali, a także ocena ich potencjalnego zagrożenia dla zdrowia człowieka i jakości środowiska. Badania wykonano na pięciu reprezentatywnych próbkach odpadów pochodzących od trzech różnych producentów, które objęły wyrzutnie 48 i 72 fajerwerków oraz grupę fontan fajerwerkowych.

W ramach realizacji pracy, zbadano zawartość grupy metali w wybranych odpadach pirotechnicznych oraz faz krystalicznych. Analizy zawartości metali w rozdrobionych próbkach wykonano metodą atomowej spektrometrii emisyjnej z plazmą sprzężoną indukcyjnie (ICP-OES), po uprzedniej ich mineralizacji w wodzie królewskiej. Skład fazowy określono metodą proszkowej dyfrakcji rentgenowskiej (PXRD). Analizy te pozwoliły na identyfikację ich głównych składników oraz potencjalnych domieszek. Analiza PXRD wykazała obecność głównie kalcytu (CaCO_3), kwarcu (SiO_2) oraz muskowitu. Obecność tych faz potwierdzają analizy zawartości metali w próbkach odpadów wykonane metodą ICP-OES, takich jak glin, wapń, magnez oraz żelazo. Szczególnie dużą zawartość wapnia 48,10% i znaczącą magnezu 4,61% stwierdzono w korpusie wyrzutni 48 fajerwerków. Z kolei w ceramice wyrzutni 72 fajerwerki, m.in. stwierdzono 3,40% żelaza oraz 6,39% potasu. Popiół ze spalania obudowy tekturowej wyrzutni 72 fajerwerki zawierał m.in. 27,98% wapnia i 3,59% glinu. Mimo, że w różnych zawartościach stwierdzono w odpadach fajerwerków pierwiastki pospolite, jak sód, potas, wapń, magnez czy glin, to w niektórych próbkach był obecny także toksyczny bar (0,21%), np. w odpadzie mieszaniny ceramiki i popiołu z fontan fajerwerkowych. Uzyskane wyniki wskazują, że odpady fajerwerków mogą powodować lokalne zanieczyszczenie środowiska, a więc powinny być zagospodarowywane zgodnie z przepisami.

Literatura

1. W. Witkowski, A. Maranda, L. Szymańczyk, W. Żmuda, Wyroby pirotechniki widowiskowej jako szczególne towary rynkowe, *Chemik*, 66, 1, 64-72, 2012.
2. S. Ajith, C. Sivapragasam, V. Arumugaprabu, A review on hazards and their consequences in firework industries, *SN Applied Sciences*, 1, 120, 2019.
3. S. Rajaram, G.D. Sivakumar, Assessment of safety culture in fireworks industry. *International Journal of Occupational Safety and Ergonomics*, 29(2), 466-473, 2023.
4. P. Prasula, I. Mazur, M. Czerwińska, P. Cieślak, Zagrożenia bezpieczeństwa stwarzane przez materiały pirotechniczne, *Problemy Techniki Uzbrojenia*, z. 165, nr 3, 41-66, 2023.



S06 PS11

Projekt wstępny instalacji fotowoltaicznej o łącznej mocy 500 kWp na elewacji oraz dachu wielopiętrowego biurowca w Łodzi, połączony z doбором paneli PV i magazynów energii

Kacper Rubisz, Andrzej Żarczyński

*Politechnika Łódzka, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej;
ul. Żeromskiego 114, 90-543 Łódź;
e-mail: andrzej.zarczyński@p.lodz.pl*

Energia słarna stanowi jedno z podstawowych odnawialnych źródeł energii wykorzystywanych przez człowieka, której źródłem jest promieniowanie elektromagnetyczne emitowane przez Słońce. Dzięki stosowaniu technologii fotowoltaicznej (PV) możliwa jest bezpośrednia konwersja promieniowania słonecznego na energię elektryczną, co ma wpływ na ograniczenie emisji gazów cieplarnianych, zmniejszenie zużycia paliw kopalnych oraz ogólne zwiększenie bezpieczeństwa energetycznego na świecie. Postęp technologiczny, spadek kosztów produkcji komponentów oraz coraz większa sprawność modułów PV powodują, że fotowoltaika jest jednym z najbardziej konkurencyjnych źródeł energii w porównaniu do konwencjonalnych technologii opartych na paliwach kopalnych [1-4].

Celem pracy było wstępnie zaprojektowanie instalacji energetycznej PV o łącznej mocy 500 kWp, zlokalizowanej częściowo na elewacji a częściowo na dachu siedemnastokondygnacyjnego biurowca, z wykorzystaniem narzędzi informatycznych wspomagających proces projektowania. W ramach realizacji pracy zaprojektowano instalację PV usytuowaną na dachu oraz elewacji południowej i zachodniej biurowca przy ul. gen. Romualda Traugutta 25 w Łodzi, uwzględniając także dach jednopiętrowego budynku nazywanego „skrzydłem”, zespolonego z wyżej wymienionym obiektem, usytuowanego w zasadniczej części po jego stronie południowej [5]. Biurowiec przy ul. gen. R. Traugutta 25 obejmuje siedziby szeregu instytucji, m.in. niektóre biura Łódzkiego Urzędu Wojewódzkiego w Łodzi, siedzibę Łódzkiej Kolei Aglomeracyjnej (ŁKA), Urzędu Regulacji Energetyki oraz firmy Textilimpex Sp. z o.o., dla której to przed laty został on zbudowany. Oprócz doboru paneli PV, falowników oraz magazynów energii, przeprowadzono także analizę techniczno-ekonomiczną projektowanej instalacji wykazując czas zwrotu kosztów w okresie 10 lat i 7 miesięcy [5].

Literatura

1. A. Juszcak, M. Maj, Rozwój i potencjał energetyki odnawialnej w Polsce. Polski Instytut Ekonomiczny, Warszawa 2020.
2. M. Alashqar, Y. Xue, C. Yang, X. P. Zhang, Comprehensive economic analysis of PV farm - A case study of Alkarsaah PV farm in Qatar. *Frontiers in Energy Research*, 10, 987773, 2022.
3. Ł. Augustowski, P. Kułyk, The economic profitability of photovoltaic installations in households in Poland from a new policy perspective. *Energies*, 16(22), 7595, 2023.
4. A. Berent, A. Żarczyński, Wstępny projekt instalacji energetycznej PV o mocy 10 MW na obrzeżu Łodzi – aspekty techniczne, lokalizacyjne, ekonomiczne i ekologiczne, *Eliksir*, nr 12, 25-32, 2023.
5. K. Rubisz, Zaprojektowanie z użyciem narzędzi informatycznych (IT) instalacji fotowoltaicznej o łącznej mocy 500 kWp na elewacji i dachu wielopiętrowego biurowca połączone z doбором paneli PV i magazynów energii, praca inżynierska, Politechnika łódzka, IChOiE, Łódź 2026.



S06 PS12

Wytwarzanie biogazu z odpadów cukrowniczych w warunkach pracy cukrowni

Izabela A. Witońska, Michał J. Binczarski, Ewa Wiktorowska-Sowa, Aleksandra Pawlaczyk,
Małgorzata I. Szykowska-Jóźwik

*Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej
90-543 Łódź, ul. Żeromskiego 114
e-mail: izabela.witonska@p.lodz.pl*

Ważnym zagadnieniem w przemyśle cukrowniczym, poprawiającym efektywność energetyczną cukrowni, jest opracowanie technologii efektywnego przekształcania odpadów roślinnych powstających w procesie produkcji cukru białego z buraków cukrowych: wysłodków, główek i ogonków oraz liści, charakteryzujących się małą stabilnością biologiczną. Po przetworzeniu 1 t buraków cukrowych pozostaje średnio 0,3 t wysłodków, a także około 0,6 t liści i 0,06 t główek i ogonków. Wysłodki zawierają pozostałości sacharozy (do 10% s.m.), a także polisacharydy: celulozę (22-40 % s.m.), hemicelulozy (gł. araban i galaktan 24-32%), pektyny (24-32%) oraz ligninę (3-4 % s.m.). Taki skład stymuluje rozwój drobnoustrojów, co wymusza konieczność szybkiego zagospodarowania produktu odpadowego. Większość wysłodków odbierana jest z cukrowni przez rolników i używana w formie wysuszonej lub ukiszzonej do skarmiania zwierząt, ale coraz częściej zdarza się, że rolnicy nie odbierają wysłodków w okresie kampanii. Natomiast, liście buraka cukrowego oraz główki i ogonki nie są wykorzystywane w przemyśle cukrowniczym i są zostawiane jako „zielony nawóz” na polach. Liście buraka cukrowego składają się głównie z celulozy (13% - 18%), hemicelulozy (11% - 17%), pektyn (14% - 18%) oraz niewielkiej ilości ligniny (5% - 6%). W 1 kg suchej masy liści znajduje się, ponadto, ok. 31 g N, 2 g P, 31 g K, 14 g Mg, 23 g Ca i 1g Si oraz mikroelementy: bor, miedź, mangan i cynk. W główkach buraków znajduje się około 12-14 % sacharozy oraz polisacharydy w ilościach typowych dla korzenia buraka.

W pracy zbadano potencjał świeżych, mrożonych oraz ukiszzonych wysłodków buraka cukrowego, liści oraz główek jako surowca w biogazowni rolniczej. Sprawdzono efektywność procesów hydrolizy kwasowej i enzymatycznej takich materiałów w kierunku otrzymywania cukrów prostych. Zbadano skład pierwiastkowy materiałów roślinnych. Dodatkowo, określono skład pierwiastkowy dodatków: gnojowicy bydłowej, obornika bydłowego i wycierki ziemniaczanej, które są rozważane jako potencjalne dodatki zwiększające efektywność procesów biogazowania. Przedstawiono również wyniki fermentacji beztlenowej (ze szczególnym uwzględnieniem wydajności metanu i wodoru) różnych mieszanin substratów. W badaniach wykorzystano konsorcja mikroorganizmów z osadów czynnych oczyszczalni ścieków w Zduńskiej Woli (oczyszczalnia komunalna), oczyszczalni ścieków cukrowniczych w Dobrzelinie oraz złoża zasiedlającego biogazownię rolniczą. Badania wykonano w instalacji laboratoryjnej składającej się z 10 szklanych bioreaktorów o pojemności 1 L (objętości roboczej 0,5 L) umieszczonych w termostacie i podłączonych do zbiorników gazu o pojemności 1L w celu pomiaru dziennej produkcji biogazu metodą wypierania wody. Bioreaktory napełniano 0,5 kg inokulum, a następnie dodawano substraty, aby uzyskać stosunek inokulum do substratu 2:1 w oparciu o stężenie substancji lotnych. Przed zamknięciem bioreaktorów, w celu uzyskania warunków beztlenowych przepłukiwano je strumieniem azotu, szczelnie zamykano i odstawiano do termostatu (temp. 35 °C). Bioreaktory były ręcznie wstrząsane dwa razy dziennie. Eksperymenty kontynuowano do momentu, w którym odnotowano jedynie resztkową produkcję biogazu lub całkowite zatrzymanie procesu. Dla każdej mieszanki przeprowadzono trzy serie eksperymentalne, a wyniki przedstawiono jako obliczone wartości średnie. Całkowitą zawartość substancji lotnych i stałych w analizowano zgodnie ze standardowymi metodami Amerykańskiego Stowarzyszenia Zdrowia Publicznego (APHA (2017), wydanie 23, USA, Waszyngton, D.C.) do badania wody i ścieków. Stężenie składników biogazu mierzono przy użyciu przenośnego analizatora gazów (DP-28, Nanosens).



S06 PS13

Analityczna ocena działania biostymulującego ekstraktu z *Cladophora glomerata* na rzeżuchę ogrodową

Radosław Pankiewicz¹, Bogusława Łęska¹, Beata Messyas², Ibtissem Ben Hammouda³, Katarzyna Pokajewicz³, Łukasz Tabisz¹, Piotr P. Wieczorek³

¹Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Polska.

²Wydział Biologii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 6, 61-614 Poznań, Polska.

³Katedra Chemii Analitycznej, Wydział Chemii i Farmacji, Uniwersytet Opolski, ul. Oleska 48, 45-052 Opole, Polska.

e-mail: radoslaw.pankiewicz@amu.edu.pl

Ekstrakty glonowe rozważane są jako naturalne biostymulatory roślin, jednak ocena ich działania wymaga zastosowania metod analitycznych umożliwiających charakterystykę zmian składu chemicznego materiału roślinnego. Celem pracy była ocena wpływu wodnego ekstraktu z *Cladophora glomerata* na wzrost rzeżuchy ogrodowej (*Lepidium sativum* L.), jej profil związków fenolowych oraz zdolność antyoksydacyjną.

Rośliny traktowano ekstraktem z glonów o różnych stężeniach, a wyniki porównano z próbą kontrolną nawadnianą wodą. Profil związków fenolowych analizowano metodą wysokosprawnej chromatografii cieczowej z detekcją za pomocą matrycy diodowej (HPLC-DAD). Analizy uzupełniono oznaczeniem całkowitej zawartości związków fenolowych i flawonoidów, oceną zawartości chlorofilu oraz pomiarem zdolności antyoksydacyjnej z wykorzystaniem testów DPPH i ABTS.

Zastosowane procedury wykazały, że ekstrakt z *C. glomerata* wpływał na wzrost roślin oraz skład ich metabolitów fenolowych. Określono jakie stężenie ekstraktu zapewniało największy plon i najwyższą zdolność antyoksydacyjną. Zastosowanie ekstraktu wiązało się również ze zwiększeniem całkowitej zawartości związków fenolowych. Analiza HPLC-DAD umożliwiła wykrycie szeregu kwasów fenolowych i flawonoidów, przy czym chryzynę stwierdzono wyłącznie w próbkach roślin traktowanych ekstraktem.

Połączenie HPLC-DAD z oznaczeniami sumarycznymi i komplementarnymi testami antyoksydacyjnymi pozwoliło na ocenę odpowiedzi chemicznej roślin na biostymulację. Wyniki wskazują na przydatność zastosowanego podejścia analitycznego oraz potencjał ekstraktu z *C. glomerata* do modyfikowania profilu fenolowego, zdolności antyoksydacyjnej i produktywności rzeżuchy.

Badania zostały wykonane w ramach grantu NCN OPUS 2021/41/B/NZ9/02584 pt. „Okrzemki epifityczne porastające makroglony słodkowodne jako źródło krzemu przyswajalnego dla roślin”



S06 PS14

Metoda wytwarzania pasz wysokobiałkowych na bazie odpadów cukrowniczych i olejarskich

Michał J. Binczarski, Ewa Wiktorowska-Sowa, Aleksandra Pawlaczyk, Małgorzata I. Szynkowska-Jóźwik, Izabela A. Witońska

*Politechnika Łódzka, Wydział Chemiczny, Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej
90-543 Łódź, ul. Żeromskiego 114
e-mail: izabela.witonska@p.lodz.pl*

W kampanii cukrowniczej 2024/2025, w 17 cukrowniach w Polsce, wyprodukowano ok. 2,6 mln ton cukru, przerabiając 18 mln ton buraków cukrowych. Z 1 tony surowca otrzymano ok. 0,5 t mokrych wysłodków o wilgotności 75-80%, które przekazano plantatorom zgodnie z umowami. Wysłodki buraczane są wykorzystywane jako pasza objętościowa w hodowli zwierząt, ale z uwagi na malejącą liczbę hodowanych zwierząt w Polsce i wzrost arealu upraw buraków cukrowych, zaczynają stanowić kłopotliwy odpad w gospodarce cukrowni. Mokre wysłodki buraczane są niestabilne mikrobiologicznie i muszą być konserwowane poprzez kiszenie w przyzmach (u plantatorów) lub suszenie (w cukrowni). Średni skład suchego peletu wysłodkowego jest następujący: sucha masa 89%, białko surowe 8-9%, JPM 0,90, NJ NEL 6,4, włókno surowe 19%, tłuszcz surowy 1%, ADF 21%, NDF 37%, popiół 5,4%, wapń 0,9%, fosfor 0,11%. Wysłodki nie dostarczają zwierzętom wystarczającej ilości białka, witamin oraz makro- i mikroelementów, stąd dieta na nich oparta musi być wzbogacana w wysokobiałkowe preparaty paszowe (np. importowaną śrutę sojową: białko 46%, sucha masa 96%, tłuszcz 2%, włókno 4%) i suplementy mineralne.

W Politechnice Łódzkiej opracowano metodę wytworzenia pasz wysłodkowych o zawartości białka porównywalnej do śruty sojowej. Wzbogacanie wysłodków w białko wykonać można na kilka sposobów, m.in. poprzez dodatek odpadów przemysłu olejarskiego. Wg GUS, produkcja rzepaku w Polsce w 2024 r. wyniosła 3,3 mln ton. Śruta i makuch rzepakowy zawiera białko (śruta 35-38%, makuch 32-33%), strawny błonnik (10-12%), tłuszcze (2-3%) oraz składniki mineralne (m.in.: wapnia, fosforu, potasu, magnezu, cynku i miedzi). Inną metodą zwiększania ilości białka w paszach wysłodkowych/śrucie i makuchu rzepakowym jest wzbogacanie ich w białko mikrobiologiczne [1]. Do hodowli drożdży i/lub bakterii mlekowych można użyć hydrolizatów z wysłodków/śruty i makucha rzepakowego lub melasu. Mikro i makroelementy można, natomiast, wprowadzić do preparatu paszowego poprzez dodatek wapna defekosaturacyjnego. Zarówno wysłodki, jak i wapno defekosaturacyjne oraz melas są produktami ubocznymi z wytwarzania cukru białego z buraków cukrowych, a ich zagospodarowanie w celu waloryzacji jakości pasz wysłodkowych przyczynia się do wypełniania założeń gospodarki obiegu zamkniętego cukrowni.

Poster przedstawia założenia opracowanej metody wytwarzania paszowego preparatu wysłodkowego (wysłodkowo-rzepakowego), wzbogaconego w białko mikrobiologiczne o parametrach zbliżonych do śruty sojowej. Przedstawione wyniki badań surowców cukrowniczych (wysłodków buraczanych, wapna defekosaturacyjnego i melasu) oraz śruty rzepakowej, a także produktów poszczególnych etapów technologicznych: preparatu po hydrolizie kwasowej, hydrolizie enzymatycznej, hodowli drożdży oraz analizy składu gotowych preparatów paszowych, wskazują na poprawność założeń badanego rozwiązania. Na zakończenie zaprezentowane zostaną wyniki testów skarmiania kurcząt brojlerów zdrożdżowaną paszą wysłodkową i wysłodkowo-sojową w porównaniu ze śrutą sojową.

1. P. Dziugan, J. Berłowska, M. Binczarski, I. Witońska, J. Piotrowski, L. Kwiatkowski, S. Nowak, PL 431409 B1 *Sposób wytwarzania biokomponentu paszowego, biokomponent paszowy otrzymany tym sposobem i jego zastosowanie*

Ocena skali zanieczyszczenia substancjami perfluoroalkilowymi opakowań mleka i wybranych produktów mleczarskich dostępnych w handlu detalicznym

Magdalena Surma¹, Tomasz Sawicki², Karolina Kusek¹, Monika Jabłońska²

¹Uniwersytet Rolniczy im. Hugona Kollątaja w Krakowie, Wydział Technologii Żywności, Katedra Technologii Produktów Roślinnych i Higieny Żywnienia
ul. Balicka 122, 30-149 Kraków
magdalena.surma@urk.edu.pl

²Uniwersytet Warmińsko-Mazurski, Wydział Nauki o Żywności, Katedra Żywnienia Człowieka
ul. Słoneczna 45F, 11-041 Olsztyn

Celem pracy było oznaczenie zawartości wybranych substancji perfluoroalkilowych (PFAS) w opakowaniach mleka i produktów mleczarskich oraz ocena skali ich zanieczyszczenia. Analizie poddano perfluoroalkilowe kwasy karboksylowe (PFCA): n-butanowy (PFBA), n-pentanowy (PFPeA), n-heksanowy (PFHxA), n-heptanowy (PFHpA), n-oktanowy (PFOA), n-nonanowy (PFNA) i n-dekanowy (PFDA) oraz perfluoroalkanosulfoniany (PFSA), w tym perfluorobutanosulfonian (PFBS), perfluoroheksanosulfonian (PFHxS) i perfluorooktanosulfonian (PFOS).

Materiał badawczy stanowiły opakowania mleka świeżego i UHT oraz wybranych produktów mleczarskich: sera twarogowego, sera podpuszczkowego, jogurtu naturalnego, kefiru, śmietany i masła dostępnych w handlu detalicznym.

Zawartość PFAS w opakowaniach oznaczono przy użyciu wcześniej opublikowanej i zmodyfikowanej metody dedykowanej do tego typu oznaczeń – Surma M., Wiczowski W., Zieliński H., Cieślik E. *Determination of selected perfluorinated acids (PFCAs) and perfluorinated sulfonates (PFASs) in food contact materials using LC-MS/MS. Packaging Technology and Science*, 2015, 28, 789-799. Próbkę po ekstrakcji poddano analizie chromatograficznej z użyciem systemu do chromatografii cieczowej (Nexera XR, Shimadzu, Japonia) sprzężonej ze spektrometrem mas (LCMS-2020, Shimadzu, Japonia). Analizę prowadzono w trybie single ion monitoring (SIM) w jonizacji ujemnej. Zastosowano elucję gradientową, a jako eluentów użyto 5 mM roztwór octanu amonu (faza A) i acetonitrylu (faza B). Prędkość przepływu fazy ruchomej wynosiła 0,15 mL/min, a objętość nastrzyku 10 µL. Rozdzielanie prowadzono na kolumnie Luna Omega 1,6 µm PS C18; 100 x 2,1 mm w temperaturze 40 °C.

Uzyskane wyniki wykazały obecność większości analizowanych związków perfluoroalkilowych we wszystkich analizowanych próbkach, przy czym częściej identyfikowano PFCA niż PFSA. Najwyższe sumaryczne stężenia odnotowano kolejno dla PFHxA (338,17 ng/g), PFBS (330,45 ng/g) oraz PFBA (229,51 ng/g). W wielu opakowaniach mleka wykryto znaczne stężenia PFCA, zwłaszcza PFBA i PFHxA. Szczególnie wysokie wartości odnotowano w opakowaniach 2% mleka UHT (48,11 ± 4,77 ng/g oraz 27,37 ± 0,71 ng/g PFBA), co może wskazywać na stosowanie papieru lub folii pokrytych powłokami zawierającymi związki fluoru. Opakowania masła również charakteryzowały się wysokimi poziomami PFAS, szczególnie jedna z próbek, w której łączna zawartość wynosiła 103,75 ng/g. Natomiast opakowania produktów fermentowanych charakteryzowały się umiarkowanymi lub niskimi stężeniami substancji perfluoroalkilowych. Na podstawie uzyskanych wyników można stwierdzić, że opakowania produktów mleczarskich stanowią istotne źródło przenikania związków z grupy PFAS do żywności. W wielu przypadkach stężenia wybranych związków w opakowaniach odpowiadały profilowi zanieczyszczeń oznaczonych w odpowiadających im produktach, co może wskazywać na migrację tych substancji do żywności.

Badania realizowane w ramach zadania pn. Sieć badawcza uczelni przyrodniczych na rzecz rozwoju polskiego sektora mleczarskiego – projekt badawczy” finansowanego z dotacji celowej Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego na podstawie umowy nr MEiN/2023/DPI/2872 z dnia 4.10.2023r.



S06 PS16

Profilowanie proteomiczne cieczy wodnistej i tkanek gałki ocznej w poszukiwaniu molekularnych sygnatur jaskry

Olha Dushna^{1*}, Andrzej Gawor¹, Anna Ruszczyńska¹, Wojciech Mazurek²,
Katarzyna Lewczuk², Joanna Jabłońska², Barbara Rękas-Mazurek²,
Marek Rękas², Ewa Bulska¹

¹Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych,
ul. Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warszawa

²Wojskowy Instytut Medyczny – Państwowy Instytut Badawczy, Klinika Okulistyki,
ul. Szaserów 128, 04-141 Warszawa
e-mail: o.dushna@uw.edu.pl

Jaskra jest przewlekłą, postępującą chorobą neurodegeneracyjną nerwu wzrokowego oraz jedną z głównych przyczyn nieodwracalnej utraty wzroku na świecie. Jej złożona etiopatogeneza obejmuje nie tylko podwyższone ciśnienie wewnątrzgałkowe, lecz również zaburzenia homeostazy komórkowej, stres oksydacyjny, odpowiedź zapalną oraz uszkodzenie neuronów. Coraz więcej danych wskazuje, że procesy te są ściśle związane ze zmianami profilu proteomicznego płynów i tkanek oka.

Celem badania była kompleksowa charakterystyka proteomiczna cieczy wodnistej oraz wybranych tkanek gałki ocznej pobranych od pacjentów z jaskrą, a także identyfikacja sygnatur białkowych związanych z patogenezą choroby. Analizę proteomiczną przeprowadzono metodą LC–MS/MS bez znakowania, z wykorzystaniem wysokorozdzielczej spektrometrii mas typu Orbitrap.

Próbki pobierano podczas rutynowych zabiegów okulistycznych od pacjentów z jaskrą, podzielonych na grupy w zależności od stopnia zaawansowania choroby, oraz od osób z grupy kontrolnej, obejmującej pacjentów z zaćmą bez rozpoznanej jaskry. Istotnym elementem badania było przeprowadzenie analizy proteomicznej indywidualnych próbek cieczy wodnistej, co umożliwiło ocenę zależności pomiędzy profilem białkowym a parametrami klinicznymi i stadium zaawansowania choroby.

Uzyskane dane proteomiczne poddano wielowymiarowej analizie statystycznej, obejmującej analizę głównych składowych (PCA). Wykazała ona wyraźne rozdzielanie próbek pochodzących od pacjentów z jaskrą i osób z grupy kontrolnej, co wskazuje na obecność odmiennych sygnatur proteomicznych. Dalsza analiza bioinformatyczna obejmowała ocenę różnic w obfitości białek z wykorzystaniem wykresów typu volcano, analizę wzbogacenia terminów Gene Ontology (GO) oraz analizę sieci oddziaływań białko–białko przy użyciu bazy STRING.

Uzyskane wyniki wskazują na istotne zmiany w poziomie białek związanych z procesami neurodegeneracyjnymi, odpowiedzią immunologiczną oraz komórkowymi szlakami odpowiedzi na stres. Zidentyfikowane sygnatury białkowe i powiązane z nimi sieci funkcjonalne mogą stanowić obiecujące źródło potencjalnych biomarkerów diagnostycznych i prognostycznych jaskry.

Badanie przeprowadzono w ramach wspólnego projektu badawczego Uniwersytetu Warszawskiego oraz Wojskowego Instytutu Medycznego – Państwowego Instytutu Badawczego pt. „Zintegrowana analiza chemiczna i proteomiczna cieczy wodnistej oraz tkanek gałki ocznej u pacjentów z jaskrą i zaćmą”.



S06 PS17

Oznaczanie związków fenolowych w napojach energetyzujących z dodatkiem ekstraktów z *Panax ginseng* i *Eleutherococcus senticosus* z wykorzystaniem metod chromatografii cieczowej sprzężonej ze spektrometrią mas i spektrofotometrii UV-Vis

Agnieszka Krzyszczyk-Turczyn¹, Ilona Sadok¹, Paweł Kubica²,
Agnieszka Szopa², Katarzyna Czarnek³

¹ Katolicki Uniwersytet Lubelski Jana Pawła II, Wydział Medyczny, Instytut Nauk Biologicznych, Katedra Chemii Biomedycznej i Analitycznej, ul. Konstantynów 1J, 20-708 Lublin, e-mail: agnieszka.krzyszczyk@kul.pl, ilona.sadok@kul.pl

² Uniwersytet Jagielloński, Collegium Medicum, Wydział Farmaceutyczny, Katedra Biotechnologii Roślin i Grzybów Leczniczych, ul. Medyczna 9, 30-688 Kraków, e-mail: p.kubica@uj.edu.pl, a.szopa@uj.edu.pl

³ Katolicki Uniwersytet Lubelski Jana Pawła II, Wydział Medyczny, Instytut Nauk Medycznych, Katedra Podstawowych Nauk Medycznych, ul. Konstantynów 1H, 20-708 Lublin, e-mail: katarzyna.czarnek@kul.pl

Napoje energetyzujące są popularne, choć budzą kontrowersje. Zgodnie z Ustawą o zdrowiu publicznym [1], zawierają kofeinę (>150 mg/L) lub taurynę, z wyłączeniem substancji naturalnie występujących w produkcie. Dopuszczalne jest także stosowanie dodatków roślinnych, o ile nie nadają produktowi statusu produktu leczniczego [2]. W praktyce napoje te często wzbogacane są ekstraktami z roślin adaptogennych, co może zwiększać zawartość związków fenolowych i ich wartość biologiczną.

Celem badań była charakterystyka wybranych napojów energetyzujących pod względem zawartości związków z grupy fenoli. Całkowite zawartości polifenoli, flawonoidów oraz antocyjanów wyznaczono odpowiednio: metodą Folina-Ciocalteu, metodą kolorymetryczną oraz metodą różnicy pH. Ponadto zastosowano metody chromatografii cieczowej sprzężonej ze spektrometrią mas, umożliwiające oznaczanie 46 związków z grupy fenoli i ich pochodnych. Analizy przeprowadzono z wykorzystaniem spektrometru mas z analizatorem typu potrójny kwadrupol oraz źródłem jonizacji typu elektrorozpylanie, stosując tryb dynamic multiple reaction monitoring (dMRM) w dodatnim i ujemnym trybie jonizacji oraz tryb selected ion monitoring (SIM). Metody zostały zoptymalizowane pod względem parametrów analitycznych. Przeprowadzono analizę komercyjnie dostępnych napojów energetyzujących zawierających ekstrakty z korzenia żeń-szeni: koreańskiego (*Panax ginseng*) oraz syberyjskiego (*Eleutherococcus senticosus*) w ilościach od 0,0004 do 0,4%. Kwas galusowy, katechina, kwas salicylowy oraz kwas dihydrokawowy zidentyfikowano we wszystkich czterech napojach energetyzujących. Komplementarne zastosowanie spektrofotometrii UV-Vis oraz chromatografii cieczowej sprzężonej ze spektrometrią mas umożliwiło zarówno ocenę całkowitej zawartości głównych grup związków fenolowych, jak i identyfikację oraz ilościowe oznaczenie wybranych związków fenolowych. Dzięki temu uzyskano kompleksową charakterystykę składu badanych napojów energetyzujących.

Podziękowanie: Praca naukowa finansowana w ramach zadania zleconego przez Ministra Nauki pt: „Badanie wpływu stosowania napojów energetyzujących i wybranych adaptogenów roślinnych na zdrowie i stan psychiczny młodych dorosłych – projekt badawczy” zgodnie z umową nr MEiN/2023/DPI/3004.



Minister
Nauki



Ministerstwo Nauki
i Szkolnictwa Wyższego

1. Ustawa z dnia 11 września 2015 r. o zdrowiu publicznym (Dz. U. z 2025 r. poz. 1121, z późn. zm.).

2. P. Mularczyk-Tomczewska, S. Garcia Hernández, A. Pandur, M. Gujski, Ł. Czyżewski, A. Silczuk, „Ann. Agric. Environ. Med. 2025.



S06 PS18

Kompleksowe monitorowanie znanych i nowo pojawiających się związków PFAS w środowisku wodnym metodą LC-MS/MS bez wstępnego przygotowania próbki

Magdalena Herok*, Hanna Barchańska**, Monika Patryka***, Maciej Chrubasik****

* Wspólna Szkoła Doktorska Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny ul. B. Krzywoustego 6, 44-100 Gliwice, magdalena.herok@polsl.pl

** Politechnika Śląska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Nieorganicznej, Analitycznej i Elektrochemii, ul. B. Krzywoustego 6, 44-100 Gliwice

*** Uniwersytet WSB Merito w Poznaniu, Oddział w Chorzowie, ul. Sportowa 29, 41-506 Chorzów, Polska

**** i2 Analytical Ltd. Sp. z o. o. oddział w Polsce, ul. Pionierów 39, 41-711 Ruda Śląska

Substancje per- i polifluoroalkilowe (PFAS) należą do grupy trwałych zanieczyszczeń środowiskowych o wysokiej mobilności i powszechnym występowaniu w środowisku wodnym. Ze względu na dużą liczbę związków oraz zróżnicowane właściwości fizykochemiczne ich oznaczanie stanowi istotne wyzwanie analityczne. Celem pracy było opracowanie metody chromatografii cieczowej z tandemową spektrometrią mas (LC–MS/MS) z bezpośrednim dozowaniem próbki do jednoczesnego oznaczania 51 związków PFAS - zarówno stosowanych historycznie, jak i ich współczesnych alternatyw technologicznych, w próbkach wód podziemnych, powierzchniowych oraz przeznaczonych do spożycia.

Zaproponowane podejście eliminuje konieczność stosowania ekstrakcji do fazy stałej (SPE), upraszczając przygotowanie próbek, skracając czas analizy oraz ograniczając zużycie rozpuszczalników i ryzyko kontaminacji. Granice oznaczalności (LOQ) opracowanej metody mieszczą się w zakresie 0,65–10 ng/L, co umożliwia analizę śladową badanych związków. Efekty matrycowe mieszczą się w zakresie $\pm 20\%$ i są skutecznie kompensowane przez zastosowanie znakowanych izotopowo wzorców wewnętrznych. Niski poziom sygnałów obserwowanych w próbach ślepych potwierdza ograniczenie wpływu zanieczyszczeń tła, natomiast zastosowanie kolumny opóźniającej umożliwia rozdzielenie sygnałów PFAS pochodzących z układu chromatograficznego od sygnałów analitów obecnych w próbkach.

Uzyskane wyniki wskazują, że metoda bezpośredniego dozowania do układu LC–MS/MS stanowi wiarygodne i efektywne narzędzie do wieloskładnikowego oznaczania PFAS w próbkach środowiskowych. Zaproponowane rozwiązanie rozszerza zakres monitorowanych analitów i może stanowić wartościową alternatywę dla konwencjonalnych procedur wykorzystujących technikę SPE w badaniach jakości wód oraz monitoringu środowiska.

Podziękowania: Praca współfinansowana z programu Doktorat Wdrożeniowy Nr SD/SDW/008-03/2024, w ramach programu Ministra Nauki pn. „Doktorat wdrożeniowy 2024”.



S06 PS19

Analiza jakości wód Morza Bałtyckiego z wykorzystaniem bezzałogowego systemu poboru próbek oraz ocena potencjału fermentacyjnego lokalnej biomasy morskiej

Alan Kreft, Jakub Pawelec

*Wydział Chemiczny, Wydział Elektrotechniki i Automatyki, Politechnika Gdańska;
ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk;
s206769@student.pg.edu.pl*

Efektywne zarządzanie zasobami Morza Bałtyckiego oraz monitorowanie jego kondycji ekologicznej wymaga systematycznego gromadzenia danych. W ramach interdyscyplinarnych projektów *Badania zmienności sezonowej usług ekosystemowych na obszarze Morza Bałtyckiego* oraz *Zintegrowany mobilny wodny system monitorująco-pomiarowy operujący w obszarach wód lądowych*, wdrożono zautomatyzowany system poboru próbek, co pozwala na zwiększenie precyzji i powtarzalności pozyskiwania matryc środowiskowych do dalszej analizy. Głównym celem pracy jest ocena sezonowych wahań wybranych parametrów fizykochemicznych wód Zatoki Gdańskiej oraz określenie przydatności lokalnej biomasy makroalg i roślinności morskiej do celów energetycznych.

Członkowie Naukowego Koła Studentów Automatyki w ramach projektu Plutonium przystosowali podwodną platformę typu ROV do pobierania próbek wody. Zakres prac obejmował konfigurację i modyfikację platformy BlueROV2 oraz opracowanie autorskiego modułu wykonawczego. Moduł zaprojektowano od podstaw z wykorzystaniem elementów wykonanych w technologii druku 3D, wodoodpornego serwomechanizmu, czterech strzykawk o pojemności 100 ml każda oraz elementów gumowych wspomagających pobór wody. Przygotowane rozwiązanie umożliwiło sprawne wykorzystanie platformy wraz z modułem podczas badań na terenie Zatoki Gdańskiej.

Członkowie Naukowego Koła Chemików Studentów Politechniki Gdańskiej dokonali analizy pozyskanych próbek. W części laboratoryjnej zebrany materiał posłużył do monitorowania wskaźników fizykochemicznych toni wodnej, takich jak: pH, przewodność, temperaturę oraz natlenienie. Równolegle, z zebranej biomasy, izolowano chlorofil za pomocą regenerowanego etanolu, pod kątem jego aplikacyjności w fotowoltaice. Ponadto surowiec roślinny poddano procesom anaerobowej kofermentacji z gnojowicą (w proporcji masowej 25:75), rejestrując zmiany ciśnienia gazów w reaktorach jako wskaźnik efektywności produkcji biogazu.

Prezentowany materiał obejmuje zestawienie dotychczasowych profili analitycznych z wcześniejszych etapów projektu z najnowszymi pomiarami realizowanymi latem 2026 roku. Korelacja danych z poprzednich okresów z najświeższymi wynikami, uzyskanymi dzięki zautomatyzowanej platformie poboru, umożliwia pełniejsze zrozumienie dynamiki transformacji materii w ekosystemie przybrzeżnym oraz dokładniejszą ewaluację potencjału gazotwórczego bałtyckiego surowca.

Projekty zostały sfinansowane w ramach programu Plutonium Supporting Student Research Team, IDUB.



S06 PS20

Zastosowanie metod chromatograficznych i spektroskopowych w analizie pogorzeliskowej jako kluczowy element ekspertyz technicznych i śledztw pożarowych

Magdalena Ligor^{1,2}, Dominika Janiszewska¹

¹*Katedra Chemii Środowiska i Bioanalityki, Wydział Chemii,
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń*

²*Instytut Studiów Zaawansowanych,
Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Wileńska 4, 87-100 Toruń
e-mail: mligor@umk.pl*

Analiza pogorzeliskowa odnosi się do analizy składu pozostałości po pożarze i ma na celu identyfikację substancji obecnych na miejscu pożaru, ustalenie jego przyczyny, w tym wykrycie ewentualnych przyspieszaczy spalania oraz ocenę stopnia zagrożenia dla zdrowia ludzi i wpływu na środowisko. Analiza pozostałości po pożarze jest kluczowa w ekspertyzach technicznych i przeprowadzeniu śledztw pożarowych.

Celem badań była optymalizacja metody SPME-GC/MS tj. dobór parametrów ekstrakcji: rodzaj włókna, temperatura, czas, mających wpływ na czułość i efektywność metody. Wobec próbek pozostałości pogorzeliskowych przeprowadzono skuteczną identyfikację lotnych związków organicznych. Analizie poddano 30 próbek, między innymi spalone elementy wyposażenia wnętrz, spaloną odzież, obuwie, materiały biurowe itp. Wśród wykrytych w badanych próbkach związków stwierdzono obecność związków z grupy węglowodorów, węglowodorów aromatycznych, WWA, alkoholi, terpenów i inne. Uwzględniono również kluczowe w ekspertyzach sądowych wykrywanie substancji łatwopalnych, z uwzględnieniem identyfikacji substancji ułatwiających zapłon (np. benzyna, nafta). Uzyskane wyniki mogą posłużyć w ocenie stopnia zagrożenia, umożliwiając określenie poziomu emisji LZO i stopnia zanieczyszczenia powietrza po pożarze związkami lotnymi.

Podziękowania: M. Ligor jest członkiem zespołu badawczego CURE - Cutting-edge Unified Research in Experimental Medicine, który funkcjonuje w ramach Priorytetowego Obszaru Badawczego Discovery, Diagnostics, Therapy for Healthcare (D2TH), wyłonionego w konkursie realizowanym w ramach programu „Inicjatywa doskonałości – uczelnia badawcza” (IDUB).



S06 PS21

Wielosezonowa analiza jakości wód powierzchniowych na terenie Nadmorskiego Parku Krajobrazowego w latach 2020–2026

Filip Zinkowski

*Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, ul. G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk
Leszczyńskich 3/17, 80-464 Gdańsk
s198467@student.pg.edu.pl*

Monitoring jakości wód powierzchniowych stanowi fundament ochrony ekosystemów wrażliwych, do których należą tereny Nadmorskiego Parku Krajobrazowego. W niniejszej pracy przedstawiono wyniki systematycznych badań prowadzonych w latach 2020–2026, realizowanych w ramach programu badawczego SONATA. Badania obejmowały cykliczne, kwartalne wyjazdy terenowe, podczas których pobierano próbki wód z kluczowych cieków, takich jak m.in. Czarna Wda, Piaśnica czy Karwianka. Program badawczy zakładał integrację pomiarów terenowych z zaawansowaną analizą laboratoryjną. W warunkach in situ dokonywano pomiarów temperatury, przewodności elektrolitycznej właściwej, pH oraz stężenia tlenu rozpuszczonego. Analiza laboratoryjna skupiała się na spektrofotometrycznym oznaczaniu jonów pierwiastków biogenych, w tym jonów amonowych, azotanowych(III) oraz fosforanowych(V), a także ocenie mikrobiologicznej z wykorzystaniem metody Colilert-18. Celem podjętych działań była ocena zmienności sezonowej jakości wód oraz identyfikacja długookresowych trendów w obciążeniu ekosystemów ładunkiem biogenów. Uzyskane wyniki wskazują na istotne zróżnicowanie parametrów w cyklu rocznym, co pozostaje w ścisłym związku z presją antropogeniczną na obszarach zlewni. Praca ta podsumowuje sześcioletni wysiłek badawczy, dostarczając danych niezbędnych do optymalizacji działań ochronnych w regionie oraz doskonalenia warsztatu naukowego członków koła.



S06 PS22

Zastosowanie biosorbentów w analityce środowiska

Grażyna Wejnerowska, Izabela Narloch

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Zakład Analityki Żywności i Ochrony Środowiska, ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz;
przemyslaw.kosobucki@pbs.edu.pl*

Zainteresowanie zastosowaniem biosorbentów do celów analitycznych z roku na rok rośnie. Jest to związane z szybkim rozwojem Zielonej Chemii Analitycznej, która skupia się na poszukiwaniu nowych rozwiązań poprawiających ogólną ocenę zieloności metod analitycznych. Jedną z metod poprawy tej ekologiczności jest zastosowanie bioodpadów jako sorbentów na etapie ekstrakcji analitów lub oczyszczania ekstraktów. Biosorbenty mogą być stosowane w postaci surowej (po wstępnej obróbce) lub jako biowęgle. W literaturze można znaleźć wiele doniesień o zastosowaniu różnego rodzaju materiałów roślinnych i biologicznych do oznaczania szerokiego spektrum związków w próbkach ciekłych. Natomiast w naszych badaniach skupiliśmy się nad wykorzystaniem do tego celu łatwych do uzyskania skorup orzechów laskowych, włoskich, ziemnych i pistacji.

W pracy przedstawiono wyniki badań nad zastosowaniem biosorbentów otrzymanych z tychże skorup orzechów w postaci surowej, jak i biowęgla. Zaproponowane procedury analityczne mogą być wykorzystane do oznaczania związków pochodzących z preparatów stosowanych w higienie osobistej (parabeny i benzofenony). Poszukiwanie łatwych i tanich procedur analitycznych do oznaczania tych związków jest uzasadnione z uwagi na coraz większe ilości tych substancji wykrywanych w ściekach i próbkach środowiskowych.

Zaproponowano sposób przygotowania skorup orzechów do sorpcji zanieczyszczeń (mielenie, mycie) oraz sposób uzyskania biowęgla (warunki pirolizy). Materiały sorpcyjne zostały scharakteryzowane przez wyznaczenie ich pojemności sorpcyjnych (BET), grup funkcyjnych (FTIR), a ich struktura została przedstawiona na podstawie zdjęć z mikroskopu skaningowego (SEM). Przeprowadzono szereg badań, aż do ustalenia najkorzystniejszego sposobu prowadzenia sorpcji i desorpcji analitów. Z czego najkorzystniejsza okazała się ekstrakcja dyspersyjna i desorpcja prowadzona rozpuszczalnikami z oddzielonego od roztworu sorbenta. Dobrano optymalne parametry tych etapów tj. czas ekstrakcji, ilość i rodzaj desorbenta, sposób prowadzenia desorpcji. Stopnie odzysku dla oznaczanych związków był zróżnicowany i wynosił nawet 98%. Natomiast granice oznaczalności są uzależnione od zastosowanej techniki analitycznej i sposobu detekcji. Opracowane metody uzyskały wyniki ekologiczności większe od 0.5 wyznaczone za pomocą narzędzia AGREEprep, co pozwala stwierdzić, że są ekologiczne i wykazują „zielony” charakter.



S06 PS23

Minimalizacja negatywnych skutków pozostałości związków farmaceutycznych w środowisku wodnym

Alicja Gackowska, Waldemar Studziński

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,
Zakład Analityki Żywności i Ochrony Środowiska;
alicja.gackowska@pbs.edu.pl;*

Pomimo korzystnych, leczniczych oddziaływań farmaceutyki budzą niepokój naukowców, ponieważ jako zanieczyszczenia zostały zidentyfikowane w wodach powierzchniowych, gruntowych i pitnych oraz w ściekach komunalnych, pochodzących ze szpitali i hodowli zwierząt [1-3], a także w ekosystemach morskich [4]. Stosowanie leków przez ludzi, odchody zwierząt hodowlanych objętych opieką weterynaryjną, czy też nielegalne składowiska odpadów to główne media wprowadzające pozostałości farmaceutyków do środowiska. Pozostałości farmaceutyków oraz ich bioaktywne metabolity, które w sposób ciągły uwalniane są z oczyszczonymi ściekami w niskich stężeniach, mogą powodować ciągłe, ale niezauważalne, niekorzystne skutki dla organizmów wodnych i lądowych. Dlatego monitorowanie źródeł transportu pozostałości farmaceutyków, identyfikacja poziomów stężeń zanieczyszczeń macierzystych jak i ich produktów transformacji oraz zrozumienie wpływu czynników środowiskowych na ich zachowanie i ocena ekotoksykologiczna to obszary wiedzy niezbędne do oszacowania stopnia szkodliwego oddziaływania na organizmy żywe i człowieka. Zanieczyszczenie, wobec których są silne przesłanki, że ich obecność w środowisku stwarza realne zagrożenie dla zdrowia i życia ludzi oraz zwierząt zostają wpisane na listę substancji obserwowanych, celem zebrania niezbędnych danych do podjęcia odpowiednich decyzji środowiskowych.

Ponadto odporność farmaceutyków na biologiczne i fizykochemiczne oczyszczanie ścieków sprawia, że poszukuje się skutecznych technik ich usuwania. Zatem konieczna jest modernizacja technologii oczyszczania ścieków. Klasyczne metody biologiczne muszą zostać uzupełnione o tzw. czwarty stopień oczyszczania, obejmujący ozonowanie, filtrację na węglu aktywnym czy zaawansowane procesy utleniania (AOP). Technologie te są jednak kosztowne i wymagają ogromnych nakładów finansowych. Ograniczanie wytwarzania odpadów farmaceutycznych to kolejny etap minimalizacji negatywnych skutków środowiskowych. Edukacja społeczeństwa i uszczelnienie systemu zbiórki odpadów medycznych to główne działania w tym zakresie.

Dużym wyzwaniem jest projektowanie leków, spełniających funkcje lecznicze, ale po wydaleniu ulegną szybkiej i całkowitej biodegradacji w środowisku, nie kumulując się w łańcuchu troficznym.

Skuteczna minimalizacja pozostałości farmaceutycznych w środowisku wymaga interdyscyplinarnego podejścia i wypracowania płaszczyzny współpracy pomiędzy jednostkami naukowymi, sektorem przemysłu farmaceutycznego a ekspertami w zakresie technologii oczyszczania ścieków.

1. Heberer T., *Occurrence, fate, and removal of pharmaceutical residues in the aquatic environment: a review of recent research data*, Toxicology Letters 131, 2002, s. 5-17.
2. Santos L.H.M.L.M., Gros M., Rodriguez-Mozaz S., Delerue-Matos C., Pena A., Barceló D., Montenegro, M.C.B.S.M., *Contribution of hospital effluents to the load of pharmaceuticals in urban wastewaters: Identification of ecologically relevant pharmaceuticals*, Science of The Total Environment, 461-462, 2013, s. 302-316.
3. Acuña V., A. Ginebreda A., Mor J.R., Petrovic M., Sabater S., J. Sumpter J., Barceló D., *Balancing the health benefits and environmental risks of pharmaceuticals: Diclofenac as an example*, Environment International, 85, 2015, s. 327-333.
4. Bonnefille B., Gomez E., Courant F., Escande A., Fenet H., *Diclofenac in the marine environment: A review of its occurrence and effects*, Marine Pollution Bulletin, 131, 2018, s. 496-506.



S06 PS24

Degradacja sulfonamidów pod wpływem czynników utleniających

Waldemar Studziński, Alicja Gackowska

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,
Zakład Analityki Żywności i Ochrony Środowiska;
waldemar.studzinski@pbs.edu.pl;*

Sulfonamidy stanowią istotną grupę farmaceutyków wykrywanych w ściekach komunalnych, wodach powierzchniowych oraz innych elementach środowiska wodnego. Ich obecność, nawet na niskich poziomach stężeń, może stanowić potencjalne zagrożenie dla organizmów wodnych oraz przyczyniać się do rozprzestrzeniania zjawiska antybiotykooporności [1,2]. Konwencjonalne procesy oczyszczania ścieków nie zawsze zapewniają ich całkowitą eliminację, dlatego coraz większe znaczenie zyskują zaawansowane procesy utleniania (AOP), umożliwiające transformację trudno usuwalnych mikrozanieczyszczeń [3]. Celem badań była ocena skuteczności wybranych procesów utleniania w degradacji sulfonamidów oraz określenie wpływu warunków prowadzenia procesu i rodzaju matrycy na efektywność przemian, a także identyfikacja powstających produktów transformacji.

Badania obejmowały procesy Fentona, układy fotoutleniania z wykorzystaniem podchlorynu sodu UV/NaOCl oraz nadtlenku wodoru UV/H₂O₂. Jako związki modelowe wykorzystano sulfametazynę (SMT), sulfadiazynę (SD) oraz sulfametoksazol (SMX). Stężenie związków macierzystych monitorowano metodami chromatograficznymi, natomiast produkty transformacji identyfikowano z wykorzystaniem chromatografii cieczowej sprzężonej ze spektrometrią mas (LC-MS).

Uzyskane wyniki potwierdziły, że badane sulfonamidy są podatne na degradację w procesach zaawansowanego utleniania, jednak skuteczność ich przemian była silnie uzależniona od rodzaju zastosowanego procesu, warunków reakcji oraz składu matrycy. Analizy wykonane techniką LC-MS potwierdziły powstawanie licznych produktów transformacji, związanych m.in. z hydroksylacją, modyfikacją pierścieni aromatycznych, rozpadem wiązania sulfonamidowego oraz dalszym rozkładem cząsteczek macierzystych. Część powstających produktów może wykazywać odmienne od związków macierzystych właściwości toksykologiczne i środowiskowe, w tym zwiększoną trwałość, zdolność do sorpcji lub potencjał transportu w środowisku wodnym. Wyniki badań ekotoksykologicznych oraz predykcji QSAR/ECOSAR wskazują ponadto, że zmniejszenie stężenia związku macierzystego nie musi być jednoznaczne ze zmniejszeniem potencjalnego zagrożenia środowiskowego.

Otrzymane rezultaty wskazują zatem na konieczność kompleksowej oceny procesów utleniania, obejmującej nie tylko kinetykę i stopień degradacji związków macierzystych, lecz również identyfikację produktów transformacji oraz ocenę ich potencjalnej toksyczności, trwałości i mobilności środowiskowej.

1. Supuran C., „Special Issue: Sulfonamides”, *Molecules*, t. 22, nr 10, s. 1642, 2017, doi: 10.3390/molecules22101642.
2. Podkowa, A. Włodarczyk, W. Opoka, i B. Muszyńska, „The use of sulfonamides in the pharmacotherapy of infectious diseases of humans and animals and the associated environmental risk”, *Medicina Internacia Revuo*, t. 28, nr 110, s. 4–10, 2018.
3. Hilles A. H., S. S. A. Amr, H. A. Aziz, i. Bashir M. J. K., „Advanced Oxidation Processes for Water and Wastewater Treatment: An Introduction”, w *Advanced Oxidation Processes (AOPs) in Water and Wastewater Treatment*, IGI Global Scientific Publishing, 2019, s. 46–69. doi: 10.4018/978-1-5225-5766-1.ch003.



S06 PS25

Ocena możliwości wykorzystania naturalnych sorbentów do usuwania metali z roztworów wodnych

Maria Kowalska, Sandra Bollin

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej
Al. prof. S. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz
maria.kowalska@pbs.edu.pl*

Metale ciężkie, w tym miedź i kadm, należą do istotnych zanieczyszczeń wód i ścieków, szczególnie tych powstających w przemyśle metalurgicznym, galwanicznym, chemicznym i elektronicznym. Ich obecność w środowisku wodnym stanowi zagrożenie dla organizmów żywych ze względu na możliwość bioakumulacji oraz występowanie negatywnych skutków toksycznych. Wśród metod stosowanych do usuwania jonów metali z roztworów wodnych wymienia się m.in. strącanie chemiczne, wymianę jonową, procesy membranowe oraz sorpcję. W ostatnich latach coraz większą uwagę poświęca się wykorzystaniu naturalnych i odpadowych materiałów roślinnych jako sorbentów, ze względu na ich dostępność, niski koszt oraz możliwość zagospodarowania odpadów zgodnie z założeniami gospodarki o obiegu zamkniętym.

Celem badań była ocena skuteczności biosorbentów otrzymanych z odpadowych materiałów roślinnych – łupin orzecha laskowego, łupin orzeszków ziemnych oraz łupin pistacji – w usuwaniu jonów Cu(II) i Cd(II) z roztworów wodnych. Analizowano wpływ wybranych parametrów procesowych, takich jak pH roztworu, czas kontaktu oraz dawka sorbentu, na efektywność procesu sorpcji.

Wszystkie badane biosorbenty wykazywały zdolność do wiązania jonów Cu(II) i Cd(II), jednak ich skuteczność sorpcyjna była zróżnicowana w zależności od rodzaju zastosowanego materiału. Najwyższą efektywność procesu uzyskano dla biosorbentu otrzymanego z łupin orzeszków ziemnych. Sorbent z łupin orzecha laskowego charakteryzował się nieco niższą, lecz nadal wysoką skutecznością, natomiast łupiny pistacji wykazywały wyraźnie mniejszą zdolność sorpcyjną. Zróżnicowanie właściwości sorpcyjnych może być związane z odmienną strukturą powierzchniową materiałów oraz obecnością i dostępnością grup funkcyjnych, takich jak grupy hydroksylowe, karboksylowe i fenolowe, uczestniczących w wiązaniu jonów metali.

Uzyskane wyniki wskazują na potencjał odpadowych materiałów roślinnych jako tanich i łatwo dostępnych biosorbentów do usuwania jonów metali ciężkich z roztworów wodnych. Wykorzystanie tego typu materiałów może stanowić również rozwiązanie wspierające ponowne zagospodarowanie odpadów organicznych oraz rozwój bardziej zrównoważonych technologii oczyszczania wód i ścieków.



S06 PS26

Chemometryczna klasyfikacja kawy *Arabica* na podstawie profilu pierwiastkowego oznaczonego techniką ICP-OES

Jonasz Tadeusz Starkiewicz, Aleksandra Pawlaczyk, Małgorzata Iwona Szynkowska-Jóźwik

*Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka,
ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź; jonasz.starkiewicz@dokt.p.lodz.pl*

Analiza składu pierwiastkowego kawy stanowi istotny element badań nad jakością, bezpieczeństwem oraz autentycznością produktów spożywczych. Oznaczanie makro- i mikroelementów może być wykorzystywane zarówno w kontroli jakości surowca, jak i w badaniach nad jego pochodzeniem geograficznym. Weryfikacja deklarowanego pochodzenia geograficznego kawy nabiera coraz większego znaczenia w kontekście ochrony konsumenta i przeciwdziałania fałszowaniu produktów spożywczych, ponieważ kraj pochodzenia bezpośrednio wpływa na profil sensoryczny i wartość rynkową kawy, czyniąc ją produktem szczególnie narażonym na nieuczciwe praktyki handlowe. Jedną ze stosowanych technik analitycznych w tego typu badaniach jest optyczna spektroskopia emisyjna z plazmą wzbudzaną indukcyjnie (ICP-OES), która umożliwia jednoczesne oznaczenie szerokiego spektrum pierwiastków przy stosunkowo niskich kosztach analizy [1].

W niniejszej pracy oznaczono stężenia 23 pierwiastków w próbkach kawy ziarnistej *Arabica* pochodzących z trzech krajów: Brazylii (BR), Kolumbii (CO) oraz Etiopii (ETH). Mineralizację próbek przeprowadzono metodą moką wspomaganą energią mikrofalową, a oznaczenia wykonano techniką ICP-OES. Najwyższe stężenia spośród oznaczonych pierwiastków wykazały makroelementy K, Mg, P, S i Ca, natomiast Cu, Sr, Ba i Zn występowały w ilościach śladowych. Uzyskane dane poddano analizie statystycznej (test Kruskala-Wallisa) oraz chemometrycznej z zastosowaniem analizy głównych składowych (PCA) i dyskryminacyjnej analizy cząstkowych najmniejszych kwadratów (PLS-DA). Test Kruskala-Wallisa wykazał istotne zróżnicowanie geograficzne dla 19 spośród oznaczonych pierwiastków ($p < 0,05$).

Uzyskane wartości stężeń pierwiastków wykazały zgodność z danymi literaturowymi dotyczącymi kawy *Arabica* z tych samych regionów geograficznych [1].

Uzyskane wyniki potwierdzają przydatność połączenia informacji otrzymanych z użyciem spektroskopii emisyjnej ICP-OES z metodami chemometrycznymi jako skutecznego narzędzia do autentykacji geograficznego pochodzenia kawy, ze szczególnym wskazaniem na przewagę modeli nadzorowanych (PLS-DA) nad metodami eksploracyjnymi (PCA) w zadaniach klasyfikacyjnych.

Praca sfinansowana w ramach grantu FU2N (Politechnika Łódzka), nr W-3D/FU2N/18/2025/G.

[1] F. Vezzulli et al., J. Sci. Food Agric., vol. 103, no. 9, pp. 4303–4316, 2023, doi: 10.1002/jsfa.12490.



S06 PS27

Izotopy ^{210}Po oraz ^{234}U i ^{238}U w hałdzie po byłej kopalni uranu w Grzmiącej

Alicja Boryło¹, Klaudia Lanczewska-Bejenka¹, Dagmara Tchorz-Trzeciakiewicz²

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

²Uniwersytet Wrocławski, Instytut Nauk Geologicznych, Zakład Gospodarki Surowcami Mineralnymi, Pl.
Maksa Borna 9, 50-204 Wrocław
alicja.borylo@ug.edu.pl

Dawne obszary wydobywania uranu mogą pozostawać długoterminowymi źródłami radioaktywnego zanieczyszczenia środowiska pomimo zakończenia działalności górniczej kilka dekad temu. Celem badania było przeanalizowanie przestrzenne, rozmieszczenie oraz zależności pomiędzy ^{238}U , ^{234}U i ^{210}Po w próbkach gleby pobranych na terenie i w otoczeniu dawnej hałdy odpadów uranowych w Grzmiącej (południowo-zachodnia Polska). Aktywności radionuklidów oznaczono metodą spektrometrii alfa po uprzednim rozdzieleniu radiochemicznym, a uzyskane dane poddano analizie z wykorzystaniem korelacji rang Spearmana oraz eksploracyjnych metod chemometrycznych, w tym analizy głównych składowych (PCA) i hierarchicznej analizy skupień (HCA). Aktywności wszystkich badanych radionuklidów wykazywały znaczną zmienność przestrzenną, przy czym najwyższe wartości stwierdzono w próbkach pobranych najbliżej szczytu hałdy, co potwierdza obecność lokalnego gradientu zanieczyszczenia. Aktywności izotopów uranu były silnie skorelowane, a stosunki aktywności $^{234}\text{U}/^{238}\text{U}$ pozostawały zbliżone do wartości odpowiadających równowadze promieniotwórczej pomiędzy badanymi nuklidami. W przeciwieństwie do izotopów uranu, ^{210}Po wykazywał większą zmienność przestrzenną, a w wybranych próbkach obserwowano wyraźnie podwyższone stosunki aktywności $^{210}\text{Po}/^{238}\text{U}$ i $^{210}\text{Po}/^{234}\text{U}$, wskazujące na lokalne zaburzenie równowagi promieniotwórczej. Proces ten może prowadzić do lokalnej akumulacji produktów rozpadu radonu oraz zaburzenia równowagi w szeregu rozpadu ^{238}U . Chociaż aktywności radionuklidów istotnie malały wraz ze wzrostem odległości od szczytu hałdy, stosunki aktywności nie wykazywały istotnej zależności od odległości. Sugeruje to, że lokalne procesy środowiskowe wpływały na rozmieszczenie polonu niezależnie od podstawowego gradientu zanieczyszczenia uranem. Eksploracyjne analizy chemometryczne potwierdziły dominujący gradient aktywności radionuklidów, a jednocześnie umożliwiły identyfikację lokalnych anomalii. W szczególności próbka GL14 wykazywała wyraźne wyższe stężenie ^{210}Po względem izotopów uranu, natomiast próbki GL2 i GL3 charakteryzowały się znacznym wzbogaceniem w izotopy uranu względem ^{210}Po . Otrzymane wyniki badań wskazują, że historyczne wydobywanie uranu nadal wpływa na rozmieszczenie radionuklidów w glebach otaczających hałdę w Grzmiącej oraz podkreślają znaczenie łączenia pomiarów radiochemicznych z wielowymiarową analizą statystyczną w identyfikacji lokalnych zaburzeń równowagi promieniotwórczej na terenach dawnego górnictwa uranowego.



S06 PS28

^{210}Po w wyrobach tytoniowych

Alicja Boryło, Klaudia Lanczewska-Bejenka

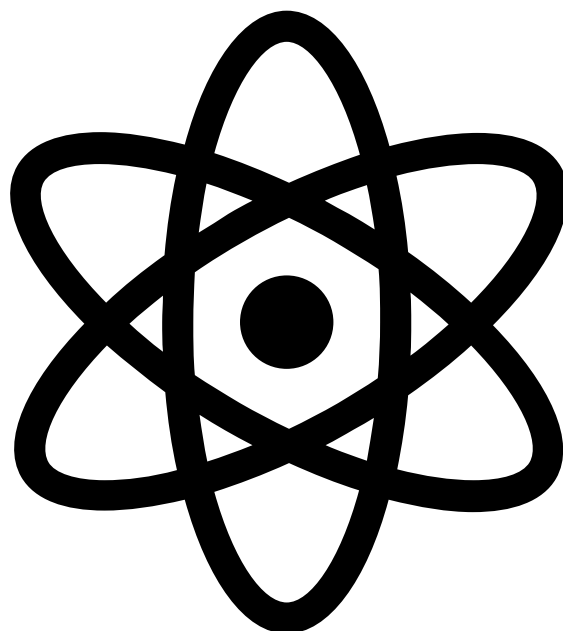
*Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk;
alicja.borylo@ug.edu.pl*

^{210}Po silnie radiotoksyczny emiter promieniowania α należący do szeregu rozpadu ^{238}U , stanowi nierozpoznany czynnik ryzyka zdrowotnego związanego z używaniem tytoniu. W wyniku inhalacji radionuklid ten odkłada się w oskrzelach i pęcherzykach płuc, narażając wrażliwe tkanki na promieniowanie o wysokim liniowym przekazie energii (LET). Celem pracy było ilościowe oznaczenie aktywności ^{210}Po oraz określenie jego rozmieszczenia w tytoniu, pozostałościach po spalaniu, filtrach i głównym strumieniu dymu w papierosach konwencjonalnych, papierosach typu slim oraz podgrzewanych wyrobach tytoniowych (HTP), a także ocena zmienności pomiędzy poszczególnymi produktami przy użyciu wielowymiarowych metod chemometrycznych. W analizowanych produktach stwierdzono znaczny transfer ^{210}Po do głównego strumienia dymu — średnio około 70%. W przypadku HTP transfer ten był istotnie niższy i wynosił około 15%, chociaż aktywności ^{210}Po w matrycy tytoniowej produktów HTP pozostawały porównywalne z wartościami obserwowanymi w innych kategoriach produktów. Analiza głównych składowych oraz analiza dyskryminacyjna wykazały częściowe grupowanie produktów HTP, podczas gdy papierosy konwencjonalnych i typu slim w znacznym stopniu się nakładały, co wskazuje na ograniczone możliwości ich rozróżnienia na podstawie kategorii produktu. Modelowanie dawek efektywnych, oparte na założeniach Międzynarodowej Komisji Ochrony Radiologicznej (ICRP) dotyczących dróg oddechowych, wykazało, że przedział pęcherzykowo-śródmiaższowy odpowiadał za największy udział tego pierwiastka w rocznej dawce skutecznej.



S07

Chemia teoretyczna i obliczeniowa





Wykłady sekcyjne



S07 WS01

Wieloreferencyjna metoda sprzężonych klasterów w ujęciu przestrzeni Focka w badaniach krzywych energii potencjalnej dwuatomowych połączeń metali alkalicznych i ziem alkalicznych

Monika Musiał, Igor Grabowski

*Uniwersytet Śląski w Katowicach, Instytut Chemii;
ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice;
monika.musial@us.edu.pl*

Treścią prezentacji jest kwantowo-chemiczny opis struktury elektronowej dwuatomowych połączeń metali alkalicznych i ziem alkalicznych, wykorzystując wieloreferencyjną metodę sprzężonych klasterów (CC) w przestrzeni Focka (FS). Kluczowe znaczenie ma tu formalizm hamiltonianu pośredniego (IH), który eliminuje dobrze znany problem stanów intruderowych, występujący w standardowym sformułowaniu wieloreferencyjnym, tj. w podejściu opartym na hamiltonianie efektywnym.

Wymiarowo ekstensywna metoda FS-CC posiada wbudowaną zdolność do dostarczania – dzięki wykorzystaniu odpowiedniego sektora FS – wyników uwzględniających korelację dla układów o zmiennej liczbie elektronów.

Koncentrując się na krzywych energii potencjalnej dla stanu podstawowego i dla stanów wzbudzonych można wskazać szereg dwuatomowych układów, które po usunięciu elektronów z układu wyjściowego ulegają dysocjacji na fragment zamkniętopowłokowe. Zastosowanie schemata DEA, tj. podwójnego powinowactwa elektronowego, czyli sektora (2,0), pozwala uzyskać doskonałe wyniki przy wyznaczaniu krzywych energii potencjalnej dla dwuatomowych układów zbudowanych z metali alkalicznych i/lub ziem alkalicznych. Znajomość precyzyjnych potencjałów międzyatomowych w takich układach ma kluczowe znaczenie, na przykład przy projektowaniu syntezy cząsteczek i jonów molekularnych w ultraniskich temperaturach.

Podziękowanie: Działania badawcze zostały wsparte ze środków przyznanych w ramach program Inicjatywa Doskonałości Badawczej Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach.



S07 WS02

Cząsteczka wodoru jako wzorzec teorii molekularnej: precyzyjne energie i przejścia rotacyjno-wibracyjne

Jacek Komasa

*Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Poznań
komasa@amu.edu.pl*

Owocne współzawodnictwo pomiędzy teorią i eksperymentem stanowi siłę napędową postępu naukowego, czego znakomitą przykładową są badania nad cząsteczką wodoru. Najnowsze osiągnięcia w technikach spektroskopowych umożliwiły uzyskanie dokładności poniżej 1 MHz ($\approx 3.3 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$) dla wybranych przejść rowibracyjnych w cząsteczce wodoru i jej izotopologach. Ten nowy poziom precyzji ujawnił niewielkie, lecz istotne rozbieżności pomiędzy pomiarami a przewidywaniami teoretycznymi, stawiając przed teorią nowe i wyjątkowo wymagające wyzwania. Osiągnięcie porównywalnej dokładności w obliczeniach kwantowomechanicznych wymaga pełnego uwzględnienia korelacji pomiędzy wszystkimi cząstkami oraz efektów skończonej masy jąder zarówno w nierelatywistycznych jak i w relatywistycznych i kwantowo-elektrodynamicznych (QED) składnikach energii. Przedstawione zostaną wyniki obliczeń przeprowadzonych z zastosowaniem czterociałowej nieadiabatycznej funkcji falowej Jamesa–Coolidge’a (naJC). Funkcja ta uwzględnia sprzężenie pomiędzy rotacyjnym momentem pędu jąder a momentem pędu elektronów co umożliwia jej efektywne zastosowanie do stanów wzbudzonych rotacyjnie i wibracyjnie. Skuteczne uwzględnienie efektów skończonej masy jąder w głównych składnikach energii pozwoliło zmniejszyć różnice pomiędzy teorią a eksperymentem do poziomu poniżej 1 MHz.



S07 WS03

Obliczeniowa spektroskopia oscylacyjna układów z wiązaniem wodorowym: wykorzystanie podejść statycznych i dynamicznych

Jarosław J. Panek, Aneta Jezierska

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii
ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
jaroslaw.panek@uwr.edu.pl

Wykorzystanie metod chemii kwantowej do przewidywania sygnatur oscylacyjnych układów z wiązaniem wodorowym wymaga przeanalizowania problemu anharmoniczności wywołanej asymetrią powierzchni energii potencjalnej, szczególnie widoczną właśnie w tej klasie struktur. Badania prowadzone w Zespole Struktury i Dynamiki Makroukładów (Wydział Chemii UWr) są przykładem zastosowania różnych rozwiązań tego problemu, w tym podejść statycznych (obliczenia kwantowochemiczne na poziomach MP2 i Teorii Funkcjonałów Gęstości) oraz dynamicznych (schemat Cara-Parrinello, CPMD).

W ramach wykładu omówione zostaną następujące projekty badawcze:

- przewidywanie częstości drgań rozciągających NH w aminach z wiązaniem wodorowym – obliczenia harmoniczne, anharmoniczne i CPMD [1],
- opis wewnątrz- i międzycząsteczkowych wiązań wodorowych w strukturach wybranych N-tlenków (obliczenia DFT, analiza SAPT) [2],
- szczególna rola skondensowanego układu aromatycznego jako przekaźnika informacji wewnątrzcząsteczkowej – przypadek pochodnych 1,4-naftochinonu [3,4].

Podziękowania

Autorzy dziękują następującym Centrom za granty obliczeniowe, udostępnienie zasobów HPC oraz przestrzeni dyskowej: Wrocławskiemu Centrum Sieciowo-Superkomputerowemu (grant nr 206), ACK Cyfronet w Krakowie (grant nr PLG/2025/018939), Poznańskiemu Centrum Superkomputerowo-Sieciowemu (przestrzeń obliczeniowa “noncovalent”).

Literatura

- [1] P. E. Hansen, J. Spanget-Larsen, J. J. Panek, A. Jezierska, Chem. Phys. 2026, 607, 113213
- [2] A. Jezierska, J. J. Panek, K. Błaziak, K. Raczyński, A. Koll, Molecules 2022, 27, 792
- [3] M. Pocheć, K. Kułacz, J. J. Panek, A. Jezierska, Int. J. Mol. Sci. 2021, 22, 10357
- [4] A. Jezierska, K. Błaziak, S. Klahm, A. Lüchow, J. J. Panek, Int. J. Mol. Sci. 2021, 22, 8033



S07 WS04

Teoria reaktywności chemicznej wyprowadzona z twierdzenia Hellmanna – Feynmana

Piotr Ordon

*Katedra Fizyki i Biofizyki
Uniwersytet Przyrodniczy
we Wrocławiu*

Pochodne sił atomowych opisują mechanizm reakcji chemicznej. Za punkt wyjścia przyjąłem dywergencję siły Hellmanna – Feynmana w rozdzielczości atomowej. Wielkość tę wprowadziłem do literatury i prowadząc jej konsekwentną analizę ustaliłem że wyznacza ona punkty na trajektorii IRC gdzie wiązania są zrywane lub powstają czyli określa mechanizm reakcji.

Dywergencje sił Hellmanna – Feynmana są źródłem indeksów reaktywności chemicznej. Wyprowadziłem związki gradientu gęstości elektronowej z wektorem pola elektrycznego co doprowadziło do nowego schematu wyznaczania indeksów reaktywności będących pochodnymi gęstości elektronowej: miękkości lokalnej, funkcji Fukui oraz ich wyższych pochodnych gęstości elektronowej. W ten sposób te teoria reaktywności chemicznej ma szansę stać się częścią DFT, gdyż indeksy reaktywności są funkcjami gęstości elektronowej.



S07 WS05

Photoinduced effects in flatland

Silvio Osella

*Afiliacja; Materials and Processes Simulation Lab, Centre of New Technologies, University of Warsaw
adres korespondencyjny; Ul. Banacha 2C, 02-097 Warsaw, Poland
e-mail: s.osella@cent.uw.edu.pl*

In recent years, a plethora of material systems have been designed and prepared to increase the performance of light harvesting and light-emitting technologies, and to develop new and attractive applications. Limitations of state-of-the-art devices based on organics (both conjugated polymers or small molecules/oligomers) derive largely from material stability issues after prolonged operation. This challenge could be tackled by leveraging the enhanced stability of carbon nanostructures (CNSs, including carbon nanotubes and the large family of graphene-based materials) in carefully designed nano-hybrid or nano-composite architectures to be integrated within photo-active layers, paving the way to the exploitation of these materials in contexts in which their potential has not been yet fully revealed [1]. In this talk, I will discuss the theoretical background behind CNSs hybridization with other low dimensional materials, focusing on different assemblies: 0D/0D considering graphene carbon dots and small molecules [2], as well as 0D/2D assemblies [3], in which we can follow the evolution of both charge and energy transfer, providing an overview of new optoelectronic and transfer properties arising from the assembly of low dimensional materials, that allow to forecast interesting future perspectives for use in real devices and molecular physics and chemistry, opening up new research directions and opportunities for collaboration.

REFERENCES

- [1] Osella S., Wang M., Menna E., Gatti T. *Optical Materials: X* **12**, 100100 (2021)
- [2] Langer M., Zdražil L., Rogach A. L., Osella S., Otyepka M. *Carbon* **2026**, 249, 121228.
- [3] Wlazło M., Langer M., Semchuk O., Osella S. *Theor. Chem. Acc.* **2025**, 144, 14.



S07 WS06

Wykorzystanie metod chemii obliczeniowej do modelowania procesów fotokatalitycznych

Dorota Rutkowska-Zbik, Renata Tokarz-Sobieraj, Vidya Kaipanchery, Agnieszka Drzewiecka-Matuszek

*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera PAN;
ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków;
dorota.rutkowska-zbik@ikifp.edu.pl*

Transformacje metanu stanowią „święty Graal” chemii w związku z dużą trwałością wiązania C-H w CH₄. Procesy te zazwyczaj wymagają wysokich temperatur i/lub ciśnień. Warunki te mogą zostać złagodzone, jeśli reakcje konwersji CH₄ przeprowadza się w warunkach fotokatalitycznych. W wyniku absorpcji światła następuje wzbudzenie cząsteczki reagenta lub katalizatora ze stanu podstawowego do wyższego stanu energetycznego, co prowadzi do powstania nowego rozkładu gęstości elektronowej i inicjuje przemiany fotochemiczne prowadzące do rozrywania lub osłabiania istniejących wiązań chemicznych i / lub powstawania nowych połączeń.

W trakcie niniejszego wykładu zaprezentujemy w jaki sposób metody chemii obliczeniowej, głównie wywodzące się z Teorii Funkcjonałów Gęstości, mogą wspierać chemików – fotokatalityków w badaniu mechanizmów reakcji waloryzacji metanu. Jako przykładową wybrano reakcję utleniającego sprzęgania metanu, w której głównymi produktami są etan i wodór, katalizowaną przez hybrydowe układy metal-heteropolikwas-TiO₂.

W pierwszej kolejności scharakteryzowano fotokatalizatory poprzez obliczenie teoretycznych wartości przerw wzbronionych tych materiałów oraz określenie natury obserwowanych przejść elektronowych. Rozważono możliwość aktywacji metanu na powierzchni katalizatorów i, dla porównania, w fazie gazowej, przez reaktywne formy tlenu (ROS), które mogą powstawać w reakcji wody i tlenu na powierzchni foto-wzbudzonego TiO₂. Następnie modelowano proces sprzęgania rodników metylowych do etanu, a także proces tworzenia wodoru, jako produktu ubocznego.

Podziękowania: Badania wykonano w ramach projektów Solar-Driven Chemistry Network nr 2019/01/Y/ST4/00024 oraz NCN Opus nr 2021/43/B/ST4/02969.

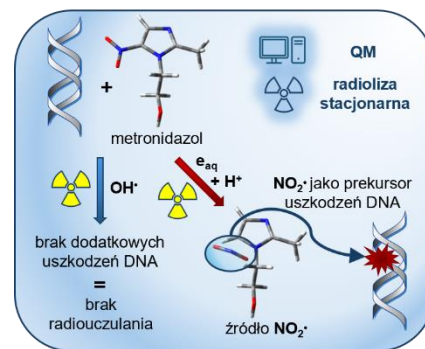
Mechanizm działania nitroimidazoli jako radiosensybilizatorów. Badania QM i radioliza stacjonarna

Lidia Chomicz-Mańka, Magdalena Zdrowowicz, Hanna Mahilevich, Paula Pryba, Janusz Rak

Pracownia Sensybilizatorów Biologicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański
ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk
lidia.chomicz-manka@ug.edu.pl

Nitroimidazole to grupa związków, które wykazują właściwości radiosensybilizujące i zostały już skutecznie wdrożone do praktyki klinicznej, jako wsparcie radioterapii nowotworów głowy i szyi najpierw w Danii (program DAHANCA), a później również w ramach badań klinicznych w innych krajach. Mimo to, mechanizm ich działania pozostaje niejasny.

Literatura wskazuje, że właściwości radiouczulające nitroimidazoli mogą być związane albo z działaniem rodników hydroksylowych [1] albo wtórnych elektronów [2], które są generowane podczas radiolizy wody pod wpływem naświetlania promieniowaniem jonizującym. Wyniki naszych badań kwantowochemicznych (QM) nad mechanizmem działania metronidazolu, wspartych radiolizą stacjonarną jego roztworów wodnych sugerują, że mechanizm radiouczulania jest związany z przyłączeniem elektronu, jak proponował Edwards [2]. Poprzedzone przyłączeniem elektronu protonowanie pierścienia nitroimidazolowego w pozycji, w której znajduje się grupa nitrowa, powoduje spontaniczne oderwanie toksycznego rodnikowego dwutlenku azotu ($\text{NO}_2^\bullet$). Rodnik ten może zainicjować jednoniciowe pęknięcie DNA, mogące finalnie prowadzić do śmierci komórki nowotworowej [3].



Zgłębiając mechanizm działania nitroimidazoli, zbadaliśmy, stosując metody radiolityczne i kwantowochemiczne, trzy proste nitroimidazole modelowe: 1-metylo-2-nitro-, 1-metylo-4-nitro- i 1-metylo-5-nitroimidazol. Radioliza stacjonarna, połączona z fluorymetrycznym oznaczeniem powstającego $\text{NO}_2^\bullet$ wykazała, że wszystkie trzy związki wytwarzają toksyczny $\text{NO}_2^\bullet$ pod wpływem promieniowania, przy czym największą wydajność obserwuje się dla 1-metylo-5-nitroimidazolu, co pozostaje w zgodzie z wynikami obliczeń QM. Sugerujemy zatem, że pozycja grupy nitrowej oraz wydajność generowania $\text{NO}_2^\bullet$ pod wpływem promieniowania mogą mieć kluczowe znaczenie w projektowaniu nowych, skuteczniejszych i bezpieczniejszych radiosensybilizatorów z grupy nitroimidazoli.

- [1] Bamatraf, M. M. M.; O'Neill, P.; Rao, B. S. M. Redox Dependence of the Rate of Interaction of Hydroxyl Radical Adducts of DNA Nucleobases with Oxidants: Consequences for DNA Strand Breakage. *J. Am. Chem. Soc.* 1998, *120*, 11852–11857.
- [2] Edwards, D. I. Nitroimidazole Drugs-Action and Resistance Mechanisms I. Mechanism of Action. *J. Antimicrob. Chemother.* 1993, *31*, 9–20.
- [3] Chomicz-Mańka, L.; Gajewicz-Skretna, A.; Zdrowowicz, M.; Kunikowska, K.; Pryba, P.; Mahilevich, H.; Torchala, M.; Rak J. Nitrogen Dioxide – a Dagger Drawn by Ionizing Radiation Track from Oxygen Mimetics: Insights from Quantum Chemistry, Chemoinformatics, and Radiation Chemistry, *Angew. Chem., Int. Ed.* przesłana do redakcji.



S07 WS08

Eksploracja i uczenie maszynowe wielowymiarowych danych spektralnych w modelowaniu fenotypu komórek

Kamilla Małek, Karolina Augustyniak, Aleksandra Pragnąca, Syeda R. Zahra

*Afiliacja; Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie
adres korespondencyjny; ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
e-mail kamilla.malek@uj.edu.pl*

Spektroskopia fourierowska w podczerwieni (FTIR) i ramanowska, wraz z ich technikami obrazowania, mają szansę stać się istotnymi, niezależnymi metodami wspierającymi testy biologiczne i diagnostykę kliniczną. Obrazowanie o rozdzielczości lateralnej, pozwalające rozróżniać pojedyncze komórki i ich organelle, stanowi platformę beznaznikowej detekcji głównych klas biomolekuł. Generowana w ten sposób 3D hiperspektralna struktura danych łączy położenie w przestrzeni (x,y) z informacją widmową (z) zakodowaną w n -wymiarowej przestrzeni. Eksploracja danych (*data mining*) jest kluczowym elementem w tych zastosowaniach i obejmuje podejścia od jedno- do wielowymiarowych, których nadrzędnym celem jest zasilanie algorytmów uczenia maszynowego do klasyfikacji fenotypu komórek. Bardzo często temu podejściu towarzyszy korelacja informacji biochemicznej zaszyfrowanej w widmie z rutynowo stosowanymi metodami diagnostycznymi, aby wygenerować i potwierdzić spektralny *kod kreskowy* stanu metabolicznego komórki. Wykorzystując ten kod oraz nienadzorowane lub nadzorowane metody chemometryczne (CA, MCR, PCA, PLS, itp.), rozróżniamy grupy eksperymentalne i wykrywamy zmiany w metabolitach pierwotnych oraz markerach stresu, zarówno w skali pojedynczego widma, jak i w skali całych map. Tak kompleksowa analiza danych stanowi podstawę spektroskopowego fenotypowania komórek dysfunkcyjnych, anormalnych czy zmienionych na skutek komunikacji międzykomórkowej lub działania stresora. W ramach niniejszego wykładu przedstawiona zostanie efektywność tych modeli w detekcji komórek nowotworowych i ich przerzutów, różnicowaniu komórek macierzystych, transformacji genetycznej roślin oraz fenotypowaniu komórek w modelach *in vitro* bariery krew-mózg.

Podziękowania: Praca została sfinansowana ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach projektu OPUS 21 (nr grantu 2021/41/B/ST4/02000).



S07 WS09

Techniki uczenia maszynowego w diagnostyce spektroskopowej

Sylwester Mazurek¹, Ewa M. Kratz²

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

²Wydział Farmaceutyczny, Uniwersytet Medyczny im. Piastów Śląskich we Wrocławiu, ul. Borowska 211A, 50-556 Wrocław

e-mail: sylwester.mazurek@uwr.edu.pl

Techniki spektroskopii oscylacyjnej są narzędziami analitycznymi coraz powszechniej stosowanymi w diagnostyce medycznej. Widma tkanek i płynów ustrojowych stanowią cenne źródło informacji chemicznej, która może zostać wykorzystana do wykrywania stanów zapalnych w organizmie, identyfikacji jednostki chorobowej oraz stopnia jej zaawansowania. Dane spektroskopowe mogą być szczególnie użyteczne w przypadku diagnostyki chorób, dla których nie opracowano jednoznacznych testów ani specyficznych markerów biochemicznych lub immunologicznych. Trafna diagnoza, zwłaszcza przypadku nieoczywistych objawów klinicznych, może znacząco przyspieszyć wdrożenie właściwego leczenia, a w niektórych wypadkach nawet decydować o życiu pacjenta.

Podstawą wykorzystania widm oscylacyjnych w diagnostyce medycznej jest identyfikacja zakresów widmowych, tzw. markerów spektroskopowych, umożliwiających rozróżnienie próbek pochodzących od pacjentów i grupy kontrolnej. Z tego względu ważnym elementem badań jest ocena skuteczności różnych metod selekcji zmiennych, na bazie których konstruowane są modele klasyfikacyjne i dyskryminacyjne. Złożoność danych pomiarowych, wynikająca z kompleksowości składu chemicznego materiału biologicznego oraz ich wymiarowości wymaga zastosowania zaawansowanych metod chemometrycznych i technik uczenia maszynowego, takich jak PLS-DA i sieci neuronowe typu counter-propagation (CP-ANN).

W prezentacji zostanie przedstawiony ogólny schemat postępowania diagnostycznego na bazie widm oscylacyjnych płynów ustrojowych oraz koncepcja modelowania hybrydowego, wykorzystującego łączenie danych spektralnych i parametrów biochemicznych. Zaprezentowane będą wyniki analiz dla zaawansowanej endometriozy, reumatoidalnego i łuszczykowego zapalenia stawów oraz przykład zastosowania widm IR w zagadnieniach związanych z diagnostyką i leczeniem niepłodności.

Quantum-mechanical protocols for decoding light–matter interactions

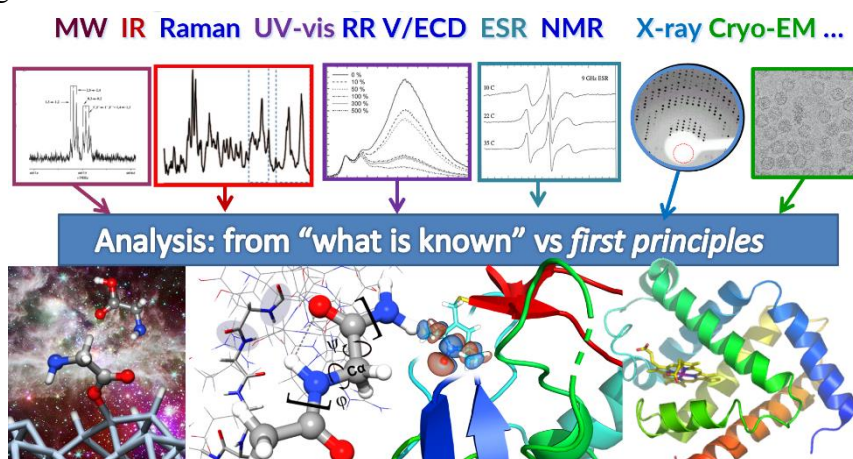
across chemical complexity: from Astrochemistry to Biomolecules

Małgorzata Biczysko

Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski
 Ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
 malgorzata.biczysko@uwr.edu.pl

Molecular systems of increasing size and chemical complexity, from small prebiotic molecules of astrochemical relevance [1–3] to large biomolecules such as proteins [4,5], are routinely investigated by broad range of experimental techniques, involving different parts of electromagnetic spectrum[6]. However, despite the abundance and richness of experimental data, extracting all relevant structural and physicochemical information remains a major challenge, particularly for complex and flexible molecular systems.

I will discuss status and perspective of the project aimed at development, validation and application of QM based computational protocols supporting to decode and analyze experimental data based on light-matter interaction.



References

1. Y. Zhao, M. Hochlaf, M. Biczysko “Identification of DNA bases and their cations in Astrochemical environments: Computational spectroscopy of Thymine as a test case” *Front. Astron. Space Sci.* 8, 757007 (2021)
2. X. Yanting, M. Biczysko “Toward the identification of cyano-astroCOMs via vibrational features: benzonitrile as a test case” *Front. Chem.* 12, 1439194 (2024)
3. J. Krupa, S. Alessandrini, C. Puzzarini, M. Biczysko „Spectroscopic Features of Weak Intermolecular Interactions: IR Spectrum of the FormamideWater Complex Revisited” *J. Phys. Chem A* 130, DOI:10.1021/acs.jpca.6c02029 (2026)
4. R Zubatyuk, M Biczysko, K Ranasinghe, NW Moriarty, H Gokcan, H Kruse, B. K. Poon, P. D. Adams, M. P. Waller, A. E. Roitberg, O. Isayev, P. V. Afonine “AQuaRef: machine learning accelerated quantum refinement of protein structures” *Nat. Commun.* 16, 9224 (2025)
5. Y. Liu, M. Biczysko, N.W. Moriarty „A radical approach to radicals” *Acta Cryst. D* 78, 43-51 (2022)
6. V. Barone, S. Alessandrini, M. Biczysko, J. R. Cheeseman, D. C. Clary, A. B. McCoy, R. DiRisio, F. Neese, M. Melosso, C. Puzzarini “Computational molecular spectroscopy” *Nat. Rev. Methods Primers* 1, 38 (2021)

Acknowledgements

This work has been supported by the National Science Centre under the SHENG 4 call, project no.2025/56/Q/ST4/00207 and the COSY COST Action CA21101 “COSY - Confined molecular systems: from a new generation of materials to the stars”. Computations have been performed at the Wrocław Centre for Supercomputing (wcss.pl).



S07 WS11

Jak środowisko kontroluje fotochemię?

Od słabych oddziaływań molekularnych do chemii lodów międzygwiazdowych

Justyna Krupa

Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski
Ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław
justyna.krupa@uwr.edu.pl

Lody międzygwiazdowe stanowią wyjątkowe środowisko, w którym pod wpływem promieniowania ultrafioletowego zachodzą procesy prowadzące do powstawania nowych cząsteczek. Niska temperatura oraz ograniczona ruchliwość reagentów i produktów reakcji sprzyjają stabilizacji nietrwałych struktur i otwierają ścieżki reakcji niedostępne w fazie gazowej. Zrozumienie tych procesów wymaga połączenia metod eksperymentalnych i teoretycznych.

W wykładzie przedstawione zostaną możliwości techniki izolacji w matrycach niskotemperaturowych sprzężonej ze spektroskopią FT-IR oraz obliczeniami kwantowo-chemicznymi w badaniach słabych oddziaływań międzycząsteczkowych i procesów fotochemicznych. Pokazane zostanie, w jaki sposób obliczenia kwantowo-chemiczne wspierają interpretację widm eksperymentalnych, umożliwiając identyfikację nietrwałych struktur molekularnych oraz wyjaśniając mechanizmy zachodzących reakcji.

Szczególna uwaga zostanie poświęcona wpływowi środowiska na przebieg fotochemii. Przedstawione wyniki pokazują, że środowisko kriogeniczne nie jest jedynie biernym otoczeniem izolującym cząsteczki, lecz może decydować o stabilności produktów, dostępności ścieżek reakcji oraz przebiegu przemian chemicznych. Omówione badania dostarczają nowych informacji o procesach zachodzących w chemii lodów międzygwiazdowych i pokazują, że połączenie spektroskopii FT-IR z obliczeniami kwantowo-chemicznymi stanowi skuteczne narzędzie do poznawania mechanizmów reakcji zachodzących w warunkach kriogenicznych.

Literatura

1. Krupa J., Kosendiak I., Wierzejewska M., New data on photochemistry of the interstellar molecule HNCS: Identification of the $S\cdots HCN$ complex, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015, 17, 22431–22437.
2. Krupa J., Wierzejewska M., New aspects of UV photolysis of hydrogen peroxide: Nitrogen matrix isolation FTIR and theoretical studies, *J. Photochem. Photobiol. A* 2016, 330, 134–139.
3. Krupa J., Kosendiak I., Wierzejewska M., Ahokas J., Lundell J., Photochemistry of glycolic acid in solid argon: An experimental and theoretical study, *J. Photochem. Photobiol. A* 2021, 412, 113236.
4. Krupa J., Wierzejewska M., Lundell J., Experimental FTIR Matrix-Isolation and Theoretical Studies of Isocyanic Acid Aggregates, *Molecules* 2023, 28, 1430.
5. Ahokas J., Nikitin T., Krupa J., Fausto R., Wierzejewska M., Lundell J., Photochemistry of Glycolic Acid in Cryogenic Matrices, *Photochem* 2023, 3, 197–208.
6. Krupa J., Kosendiak I., Wierzejewska M., Lundell J., Experimental and Theoretical Investigation of Hydrogen-Bonded Complexes between Glycolic Acid and Water, *Spectrochim. Acta A* 2025, 325, 125081.

Podziękowania

Badania przedstawione w niniejszym wykładzie zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach projektu OPUS nr 2013/11/B/ST4/00500 oraz projektu SHENG4 nr 2025/56/Q/ST4/00207. Dodatkowe wsparcie zapewniła Academy of Finland (projekty nr 286844 i 332023) oraz COST Action CA21101 COSY. Obliczenia przeprowadzono z wykorzystaniem zasobów obliczeniowych Wrocławskiego Centrum Sieciowo-Superkomputerowego (WCSS).



S07 WS12

Fotochemia związków heterocyklicznych w matrycach kriogenicznych – od eksperymentu do obliczeń kwantowo-chemicznych

Magdalena Pagacz-Kostrzewa

*Wydział Chemii, Uniwersytet Wrocławski
ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska
magdalena.pagacz-kostrzewa@uwr.edu.pl*

Fotochemiczne przemiany związków heterocyklicznych odgrywają istotną rolę w wielu procesach chemicznych, jednak mechanizmy prowadzące do powstawania produktów reakcji często pozostają niewyjaśnione. Celem pracy było zbadanie wpływu budowy cząsteczek na przebieg przemian fotochemicznych wybranych związków heterocyklicznych oraz określenie mechanizmów odpowiedzialnych za powstawanie obserwowanych fotoproduktów.

Badania prowadzono z wykorzystaniem spektroskopii FTIR połączonej z techniką izolacji matrycowej w niskich temperaturach. Przemiany fotochemiczne indukowano promieniowaniem UV i NIR. Do interpretacji wyników zastosowano obliczenia kwantowo-chemiczne, które umożliwiły identyfikację struktur powstających produktów oraz analizę możliwych dróg przebiegu reakcji.

W badanych układach obserwowano różne typy przemian fotochemicznych, obejmujące zmiany konfiguracji geometrycznej, przegrupowania strukturalne oraz procesy przeniesienia protonu prowadzące do powstawania nowych form tautomerycznych (fototautomeria). W niektórych układach zachodziła również fotodekompozycja badanych związków. Wykazano, że nawet niewielkie zmiany w budowie cząsteczek mogą znacząco wpływać na kierunek zachodzących przemian i trwałość powstających produktów. Zestawienie wyników eksperymentalnych z obliczeniami pozwoliło na wiarygodną identyfikację fotoproduktów oraz wyjaśnienie mechanizmów ich powstawania [1-4].

Uzyskane wyniki potwierdziły, że połączenie techniki izolacji matrycowej z obliczeniami kwantowo-chemicznymi stanowi skuteczne narzędzie do badania fotochemii związków heterocyklicznych. Badania te stanowią również podstawę do analiz procesów zachodzących w astromikrośrodkach gaz-lód, gdzie promieniowanie kosmiczne oraz niskie temperatury determinują ewolucję cząsteczek o znaczeniu prebiotycznym. Zdobyta wiedza dotycząca mechanizmów fototransformacji może zostać wykorzystana do interpretacji fotochemicznych przemian prekursorów aminokwasów oraz innych związków istotnych dla chemii prebiotycznej w warunkach symulujących ośrodek międzygwiazdowy. Przedstawione podejście umożliwia lepsze zrozumienie zależności między budową cząsteczek a przebiegiem reakcji fotochemicznych i może być wykorzystane w badaniach innych układów molekularnych.

- [1] M. Pagacz-Kostrzewa, A. Bil, M. Wierzejewska, J. Photochem. Photobiol. A 335 (2017) 124-129.
- [2] M. Pagacz-Kostrzewa, M. Sałdyka, A. Bil, W. Gul, M. Wierzejewska, D.M. Khomenko, R.O. Doroschuk, J. Phys. Chem. A 123 (2019) 841-850.
- [3] M. Pagacz-Kostrzewa, M. Sałdyka, A. Bil, W. Gul, M. Wierzejewska, D.M. Khomenko, R.O. Doroschuk, J. Photochem. Photobiol. A 371 (2019) 292-299.
- [4] M. Pagacz-Kostrzewa, W. Szaniawska, M. Wierzejewska, Spectrochim. Acta A 290 (2023) 122283.

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu SHENG 4 nr 2025/56/Q/ST4/00207. Autorka dziękuje Wrocławskiemu Centrum Sieciowo-Superkomputerowemu za udostępnienie zasobów obliczeniowych.



S07 WS13

Molekularna gra o życie

Robert Wieczorek, Paulina Potok, Martyna Zawada, Elżbieta Gumienna-Kontecka,
Sławomir Potocki

Uniwersytet Wrocławski;

Wydział Chemii ul. Joliot-Curie 14, Wrocław;
robert.wieczorek@uwr.edu.pl

Rozwój nowotworów i ich zdolność do tworzenia przerzutów są determinowane przez zmiany genetyczne w komórkach nowotworowych oraz przez złożone interakcje z otaczającym mikrośrodowiskiem. Kluczową rolę w tym procesie odgrywają białka macierzy zewnątrzkomórkowej (ECM – *extracellular matrix*) oraz chemokiny - małe cząsteczki sygnałowe kierujące migracją komórek. Macierz zewnątrzkomórkowa to sieć białek strukturalnych, takich jak kolagen, elastyna, fibronektyna i laminina, które tworzą fizyczną barierę dla komórek nowotworowych. Aby guz mógł się rozprzestrzeniać, musi tę barierę pokonać. Służą do tego enzymy proteolityczne, przede wszystkim metaloproteiny macierzy (MMP). W szczególności MMP-14, który degraduje kolagen i aktywuje inne MMP, takie jak MMP-2, co umożliwia komórkom nowotworowym przenikanie przez macierz zewnątrzkomórkową i naciekanie sąsiednich tkanek. Nadmierna aktywność MMP jest typową cechą nowotworów zaawansowanych i koreluje ze zwiększonym ryzykiem przerzutów.

Równie istotnym elementem mikrośrodowiska nowotworowego są chemokiny - białka o masie ok. 8-14 kDa, które działają jako chemotaktyczne czynniki przyciągające (chemoatraktanty). Komórki nowotworowe często wykorzystują układ chemokin do ukierunkowanej migracji w stronę narządów docelowych. Najlepiej poznany przykładem jest oś CXCL12/CXCR4 - chemokina CXCL12 jest wydzielana między innymi w szpiku kostnym, płucach i wątrobie, a jej receptor CXCR4 występuje na powierzchni wielu komórek nowotworowych, np. raka piersi czy prostaty. Interakcja tych cząsteczek kieruje komórki nowotworowe do tych właśnie narządów, co tłumaczy narządową specyficzność przerzutowania. Naturalnymi inhibitorami MMP są białka TIMP (badania na komórkach nowotworowych *in vitro* i *in vivo* sugerują, że potencjał inwazyjny nowotworu może być zależny od interakcji MMP-TIMP, gdzie przewaga aktywności MMP zwiększa ten potencjał, a nadmiar białek TIMP zmniejsza lub znosi inwazyjność). W nowotworach aktywność TIMP jest często stłumiona, co prowadzi do przewagi proteolizy.

Zrozumienie tych mechanizmów otwiera możliwości terapeutyczne - od inhibitorów MMP, przez antagonistów receptorów chemokinowych (np. przeciwciała anti-CXCR4), po inhibitory białek opiekuńczych. Ze względu na złożoność i redundancję szlaków, największą nadzieją są terapie łączone, równocześnie blokujące kilka kluczowych punktów tej sieci molekularnej.

Badania przeprowadzone przy użyciu metod obliczeniowych chemii kwantowej nad **wybranymi peptydami o wysokim powinowactwie do metali** umożliwiły badania nad inhibitorami MMP-14. Układy te stanowią wartościowe modele do projektowania nowych inhibitorów MMP-14 o potencjalnym zastosowaniu w terapii nowotworowej.

Zastosowanie funkcji LOL (localized orbital locator) do opisu wzbudzeń elektronowych cząsteczek

Tatiana Korona¹, Munavvar Husain¹, Dorota Rutkowska-Żbik²

¹ Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa

² Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. J. Habera (PAN), ul. Niezapominajek 8,

30-239 Kraków

Funkcja LOL (localized orbital locator) została zaproponowana jakiś czas temu [1-2] do badania struktury elektronowej cząsteczek w stanie podstawowym. Analiza przebiegu zmienności LOL w 3-wymiarowej przestrzeni i wartości tej funkcji w punktach stacjonarnych umożliwia opis tej struktury zbliżony do punktu widzenia chemika, tzn. poprzez identyfikację wiązań między atomami oraz typów tych wiązań. Wynika to ze specyfiki tego deskryptora, który oparty jest na gęstości energii kinetycznej i porównaniu jej z gęstością hipotetycznego gazu nieoddziałujących elektronów. W niniejszym badaniu wykazujemy, że te własności funkcji LOL można z powodzeniem wykorzystać do opisu wzbudzonych stanów elektronowych, w szczególności do wykrywania zmian w strukturze elektronowej, wywołanych samym wzbudzeniem, w tym m.in. zmian: charakteru wiązań (w tym również zerwania wiązania) oraz liczby i rodzaju wolnych par elektronowych. Co więcej, funkcja LOL umożliwia też analizę struktury elektronowej dalekiego zasięgu, w szczególności większego rozmycia średniego położenia elektronów we wzbudzeniach typu Rydberga, przesunięcia gęstości elektronowej między grupami funkcyjnymi wywołanymi przez przejścia z przeniesieniem ładunku itp. Pokazujemy też, że wnioski na temat struktury elektronowej otrzymane za pomocą LOL pokrywają się z opisem uzyskanym z wykorzystaniem analizy par cząstkowo-dziurowych NTO (natural transition orbitals), ale są od nich bardziej szczegółowe, w tym umożliwiające porównanie ilościowe na poziomie poszczególnych połączeń międzyatomowych [3].

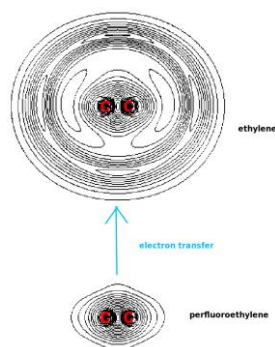
Literatura:

1. H.L. Schmider, A.D. Becke, Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 527, 51-61 (2000); The Journal of Chemical Physics, 116, 3184-3193 (2002)
2. H. Jacobsen, Canadian Journal of Chemistry, 86, 695-702 (2008)
3. T. Korona, Munavvar Husain, D. Rutkowska-Żbik, repozytorium UW (2025) <https://doi.org/10.58132/ZWOBP>

Podziękowania:

Badania te są finansowane z grantu NCN OPUS 2021/43/B/ST4/02969.

Obliczenia zostały wykonane z wykorzystaniem infrastruktury PLGrid (grant PLG/2023/016573).





S07 WS15

Kinds and significance of correlation terms in physics-based coarse-grained force fields

Elizaveta F. Petrushevich, Adam K. Sieradzan, Cezary Czaplewski, Celina Sikorska, Adam Liwo*

Faculty of Chemistry, University of Gdańsk, Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

Coarse-graining is nowadays of great importance in theoretical modeling of the structures and properties of biological macromolecules, biomolecule assemblies, and materials owing to the extension of the simulation time scale by orders of magnitude. In this approach, groups of atoms are merged into single interaction sites. The pertinent energy functions originate from the potentials of means force (PMF) of the respective systems, in which the degrees of freedom not included in a model (the secondary degrees of freedom) are averaged out. The coupling of the (hidden) secondary degrees of freedom gives rise to substantial correlation or multibody terms, which must be considered for reliable modeling. In this talk, the origin and form of the coupling terms will be presented in the framework of the scale-consistent theory of coarse-graining [1], which is based on factorization of the PMF into Kubo cluster cumulant functions [2]. The correlation terms present in the coarse-grained UNRES force field for proteins [3] will be discussed. These include the torsional double-torsional and multitorsional terms that describe the coupling between the local conformational states of amino-acid residues along the polypeptide chain, and those of the coupling between backbone-electrostatic and backbone-local interactions. The importance of the correlation terms will be demonstrated with the examples of the modeling of protein structure and dynamics. It will also be demonstrated that the coupling resulting in the correlation terms, such as the multitorsional potentials, is manifested in the statistics derived from the protein structures deposited in the Protein Data Bank.

[1] A. Liwo et al., in *Computational Approaches for Understanding Dynamical Systems: Protein Folding and Assembly*, *Progress in Molecular Biology and Translational Science* Vol. 170, edited by B. Strodel and B. Barz (Academic Press, 2020), pp. 73–122.

[2] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 1100–1120 (1962)

[3] A.K. Sieradzan et al., in *Protein Folding: Methods and Protocols*, edited by V. Munoz (Springer US, New York, 2022), pp. 399–416.

*Presenting author.



S07 WS16

Estimation of Charge-Transfer Excitation Energies from Energy Decomposition Analysis

Olga Zurowska,^{1,2} Marcin Andrzejak,¹ Artur Michalak¹

¹*Faculty of Chemistry, Jagiellonian University, Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, Poland;*

²*Doctoral School of Exact and Natural Sciences, Jagiellonian University, Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków, Poland*

e-mail: michalak@chemia.uj.edu.pl

We present a computationally efficient method for estimating inter-molecular charge-transfer (CT) excitation energies based on energy decomposition analysis (Extended-Transition-State, ETS). This approach evaluates CT energies from based on ground-state density functional theory calculations only, with neutral and charge-separated fragmentations at fixed geometry, i.e. without explicit excited-state calculations. The CT energy is obtained by combining fragment ionization potential and electron affinity terms with electrostatic and Pauli repulsion contributions obtained from ETS analysis. The proposed approach correctly reproduces the asymptotic behavior of CT excitation energies. Benchmark results for a variety of CT complexes show relatively good agreement with experimental reference values across several exchange–correlation functionals, including generalized gradient approximations. The ground-state orbital-interaction term can form a basis for a simple correction that can significantly improve accuracy. The method provides a low-cost framework for analyzing CT energetics in weakly interacting donor–acceptor systems..

Acknowledgements: The research was funded by the National Science Centre, Poland, grant UMO-2022/04/Y/ST4/00154 (M-ERA.NET 3 Call 2022). We gratefully acknowledge Polish high-performance computing infrastructure PLGrid (HPC Center: ACK Cyfronet AGH) for providing computer facilities and support within computational grant numbers PLG/2024/017261, PLG/2025/018396, PLG/2025/019019; part of the calculations was conducted using equipment purchased with funds from the European Regional Development Fund under the Innovative Economy Operational Program (project POIG.02.01.00-12-023/08)



S07 WS17

Wpływ efektu podstawnikowego na strukturę elektronową oraz odpowiedź optyczną układów barwnik–półprzewodnik

Anna Jezuita

Uniwersytet Jana Długosza w Częstochowie;
ul. Armii Krajowej 13/15, 42-200, Częstochowa
a.jezuita@ujd.edu.pl

Barwnikowe ogniwa słoneczne (DSSC) wykorzystują organiczne sensybilizatory zaadsorbowane na powierzchni półprzewodnikowej fotoanody ZnO w celu zwiększenia absorpcji promieniowania słonecznego. Aby barwnik był odpowiedni dla hybrydowych ogniw słonecznych, poziom LUMO barwnika musi znajdować się powyżej pasma przewodnictwa półprzewodnika. Modyfikacje barwników za pomocą podstawników umożliwiają lepsze dopasowanie ich właściwości do fotoanody oraz usprawniają wewnątrzcząsteczkowy transfer elektronów w kierunku elektrod półprzewodnikowych. Badania efektu podstawnikowego (EP) za pomocą modeli chemii kwantowej są pomocne w zrozumieniu mechanizmu przenoszenia elektronów na granicy faz barwnik/fotoanoda.

Opisano wpływ różnych podstawników X na właściwości elektronowe organicznych barwników typu Donor- π -Akceptor, opartych na cząsteczce trifenyloaminy, zawierających sprzężony układ π -elektronowy oraz akceptorową grupę kotwiczącą $-\text{COOH}$. EP analizowano dla izolowanych barwników (TPAD), jak i układów barwnik-ZnO, w których barwniki były zaadsorbowane na powierzchni fotoanody z tlenku cynku (TPAD/ZnO). Zarówno część donorową, jak i aromatyczny łącznik barwnika modyfikowano za pomocą podstawników elektronodonorowych i elektronoakceptorowych ($X = \text{N}(\text{CH}_3)_2, \text{NH}_2, \text{OH}, \text{OCH}_3, \text{H}, \text{F}, \text{Cl}, \text{CHO}, \text{CN}, \text{NO}_2$). Analizie poddano również wpływ rodzaju pierścienia łącznika oraz środowiska rozpuszczalnika. Właściwości elektronowe obliczono metodą DFT/B3LYP. Wpływ i siłę EP oceniono na podstawie wybranych parametrów kwantowo-chemicznych, w tym cSAR (ładunek obszaru aktywnego podstawnika) i jego modyfikacji, ilościowych wskaźników aromatyczności HOMA (*Harmonic Oscillator Model of Aromaticity*) i EDDB (*Electron Density of Delocalized Bonds*) oraz energii orbitali HOMO i LUMO. Nanocząstkę $(\text{ZnO})_{28}$ skonstruowano na podstawie struktury objętościowego kryształu ZnO typu wurcyt. Widma absorpcji elektronowej obliczono metodą TD-DFT z użyciem długozasięgowo skorygowanego funkcjonału CAM-B3LYP. Zmiany struktury elektronowej wybranych grup funkcyjnych w XTPAD i XTPAD/ZnO wskutek EP skorelowano ze zmianami ich parametrów optycznych i fotofizycznych, w tym energii wstrzykiwania elektronu oraz widm absorpcji.

Analiza cSAR pozwoliła określić, które pozycje podstawienia są najbardziej efektywne dla przenoszenia ładunku z donora na akceptor barwnika, z uwzględnieniem struktury elektronowej grupy kotwiczącej i akceptora, zmian aromatyczności łącznika i właściwości optycznych układu [1]. Wartości cSAR sugerują, że część akceptorowo-ZnO przyjmuje więcej elektronów po wprowadzeniu silnie elektronodonorowego podstawnika X. Efekt ten zależy od pozycji podstawienia i jest silniejszy, gdy X jest przyłączony do części donorowej niż do łącznika barwnika. Uzyskane korelacje liniowe wykazały, że zmiany struktury elektronowej części donorowej (q_{Donor}) i akceptorowej (cSAR(Akceptor)) barwnika wskutek EP korelują odpowiednio ze zmianami energii HOMO i LUMO. Za pomocą EDDB określono rozkład delokalizacji π -elektronowej na poszczególnych wiązaniach barwnika. Podejście to pozwala przewidywać siłę odpowiedzi optycznej danej modyfikacji struktury barwnika.

[1] Jezuita, A.; Makowska-Janusik, M.; Ejsmont, K.; Szatyłowicz, H. Impact of Substituent Effect on the Electronic and Optical Properties of TPA-Based Dyes Adsorbed on ZnO Nanoparticles Using Quantum Chemical Methods. *J Phys Chem A*, 2026, w trakcie odpowiedzi na recenzje

Podziękowanie: A. Jezuita: grant nr 2023/07/X/ST3/00064; Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe (<http://wcss.pl>), granty obliczeniowe Nr 171, Nr hpc-ajezuita-1723128589

(Nie)stałe podstawnikowe? Od superpodstawników do modeli kaskadowych

Anna Czombik, Tomasz Siodła

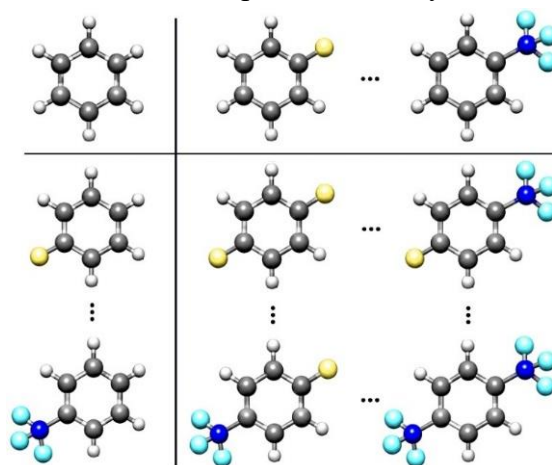
*Uniwersytet Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii,
 Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;
 tsiodla@amu.edu.pl*

Efekt podstawnikowy pozostaje jednym z fundamentalnych zagadnień chemii organicznej i teoretycznej, jednak jego ilościowy opis nadal bazuje na parametrach wyznaczanych dla pojedynczych układów referencyjnych, obejmujących przede wszystkim klasyczne skale empiryczne oraz deskryptory teoretyczne. W konsekwencji funkcjonuje wiele parametrów (m.in. σ , σ^+ i σ^-), których wartości zależą od właściwości zastosowanej sondy molekularnej. W ramach prowadzonych badań opracowano nową koncepcję uniwersalnej parametryzacji efektów podstawnikowych z wykorzystaniem metod chemii obliczeniowej.

Podstawę zaproponowanego podejścia stanowi kompletna macierz oddziaływań podstawnik–podstawnik wyznaczona z wykorzystaniem parametru SESE (Substituent Effect Stabilization Energy)^[1] dla układów typu X–Ar–Y. Opracowany model kaskadowy wykorzystuje kolejne etapy regresji liniowej do wyznaczania parametrów opisujących właściwości podstawnika sondującego, a nie – jak w klasycznym podejściu – wyłącznie podstawnika sondowanego. Dzięki uwzględnieniu oddziaływań z całym zbiorem podstawników referencyjnych otrzymane parametry mają znacznie bardziej uniwersalny charakter niż klasyczne stałe podstawnikowe.

Istotnym aspektem badań jest również projektowanie wysokoczułych sond molekularnych. Wykazano, że stosunek sygnału do szumu zależy od liczby i charakteru elektronowego podstawników sondujących.^[2,3] W oparciu o metody DFT zaproponowano pierwszy wirtualny superpodstawnik o ekstremalnych właściwościach elektronowych, umożliwiającą znaczące zwiększenie zakresu zmienności wartości SESE, a tym samym poprawę rozdzielczości analiz efektu podstawnikowego.

Połączenie modeli kaskadowych z projektowaniem wirtualnych superpodstawników pozwala przezwyciężyć ograniczenia klasycznych skal empirycznych i otwiera drogę do opracowania nowej generacji uniwersalnych parametrów efektów podstawnikowych.



Podziękowania dla infrastruktury PLGrid (Centrum Komputerów Dużej Mocy: CI TASK) za udostępnienie zasobów obliczeniowych oraz wsparcie w ramach grantu obliczeniowego nr PLG/2026/019246.

1. T. Siodła, W.P. Ozimiński, M. Hoffmann, H. Koroniak, T.M. Krygowski, *J. Org. Chem.* **2014**, 79, 7321–7331.
2. T. Siodła, K. Anastaziak, H. Koroniak, *J. Mol. Struct.* **2021**, 1246, 131186.
3. A. Sokół, H. Koroniak, M. Hoffmann, T. Siodła, *Molecules* **2022**, 27, 4173.



S07 WS19

Ultrazimne silnie magnetyczne i polarne cząsteczki do symulacji kwantowych i poszukiwań nowej fizyki

Michał Tomza

*Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski
m.tomza@uw.edu.pl*

Ultrazimne mieszaniny zawierające silnie magnetyczne atomy, takie jak $\text{Er}+\text{Li}$, $\text{Dy}+\text{K}$, $\text{Cr}+\text{Li}$ oraz $\text{Er}+\text{Yb}$, zostały już otrzymane w celu badania egzotycznych kwantowych faz układów wielu ciał. Mieszaniny te otwierają również drogę do tworzenia ultrazimnych cząsteczek dwuatomowych charakteryzujących się zarówno znacznym magnetycznym, jak i elektrycznym momentem dipolowym. Cząsteczki zawierające atomy o dużym orbitalnym momencie pędu, takie jak Dy i Er , mają niezwykle złożoną strukturę wewnętrzną oraz chaotyczne widma rotacyjno-wibracyjne. Z kolei cząsteczki zawierające silnie magnetyczne atomy o symetrycznej strukturze elektronowej, takie jak Cr lub Eu , mogą tworzyć egzotyczne cząsteczki o podwójnej polarność, których struktura jest łatwiejsza do przewidzenia. Natomiast cząsteczki złożone z elektroujemnych metali grupy miedziowców, takich jak Ag , oraz atomów metali alkalicznych powinny wykazywać bardzo duże trwałe elektryczne momenty dipolowe.

W swoim wystąpieniu przedstawię kilka klas silnie polarnych i paramagnetycznych cząsteczek dwuatomowych, które można wytwarzać w ultraniskich temperaturach z atomów schłodzonych laserowo. Omówię nowy mechanizm powstawania użytecznych rezonansów Feshbacha w mieszaninach $\text{Cr}+\text{Yb}$ [1] oraz zastosowanie cząsteczek YbCr w stanie podstawowym do poszukiwania nowej fizyki [2]. Przedstawię także niedawną eksperymentalną realizację słabo związanych cząsteczek LiCr oraz nasze teoretyczne przewidywania dotyczące możliwości przeniesienia ich do absolutnego stanu podstawowego [3], a także całkowicie optyczne metody tworzenia silnie polarnych cząsteczek KAg i CsAg [4]. Na zakończenie omówię możliwe zastosowania ultrazimnych, silnie polarnych i paramagnetycznych cząsteczek dwuatomowych do badania kontrolowanych zderzeń i reakcji chemicznych, a także w precyzyjnych pomiarach, symulacjach kwantowych i obliczeniach kwantowych.

- [1] M. D. Frye, P. S. Żuchowski, M. Tomza, Phys. Rev. Research 6, 023254 (2024)
- [2] A. Ciamei, A. Koza, M. Gronowski, M. Tomza Phys. Rev. X 16, 011052 (2026)
- [3] S. Finelli, A. Ciamei, B. Restivo, M. Schemmer, M. Inguscio, A. Trenkwalder, K. Zaremba-Kopczyk, M. Gronowski, M. Tomza, M. Zaccanti, PRX Quantum 5, 020358 (2024)
- [4] M. Śmiałkowski, M. Tomza, Phys. Rev. A 103, 022802 (2021)



S07 WS20

Szczotki polimerowe w dobrym i złym rozpuszczalniku.

Symulacje metodą Monte Carlo

Andrzej Sikorski^a, Piotr Polanowski^b

^a Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, Pasteura 1, 02-093 Warszawa

^b Katedra Fizyki Molekularnej, Politechnika Łódzka, Żeromskiego 114, 90-543 Łódź
sikorski@chem.uw.edu.pl

Zaprojektowano i zbadano uproszczony gruboziarnisty model szczotki polimerowej utworzonej przez giętkie łańcuchy liniowe. Łańcuchy te zostały szczepione do nieprzepuszczalnej powierzchni, a pozycje koralików były ograniczone do wierzchołków sieci sześcienniej centrowanej powierzchniowo. W układzie, który był całkowicie wypełniony znajdował się jawny rozpuszczalnik. Badania przeprowadzono w szerokim zakresie jakości rozpuszczalnika oraz gęstości szczepienia i długości łańcuchów, umożliwiając analizę sprzężenia efektów konformacyjnych i struktury rozpuszczalnika w warstwie przyściennej. Właściwości tego układu określono za pomocą symulacji Monte Carlo z wykorzystaniem Algorytmu Ruchów Kooperatywnych. Określono rozmiary i strukturę szczotki w zależności od jakości rozpuszczalnika, gęstości szczepienia i długości łańcuchów. Wykazano, że klasyczny obraz monotonicznego zapadania się szczotki w złym rozpuszczalniku nie jest w ogólności spełniony. Zamiast tego ujawnia się nieliniowa, wieloreżimowa odpowiedź struktury szczotki, obejmująca anomalne maksima rozmiarów łańcuchów oraz ich składowych prostopadłych do powierzchni w funkcji gęstości szczepienia. Kluczowym elementem tego zachowania jest spontaniczne tworzenie obszarów lokalnej akumulacji rozpuszczalnika wewnątrz warstwy polimerowej, prowadzące do efektywnej separacji przestrzennej między regionami bogatymi w polimer i rozpuszczalnik. Pokazano, że mechanizm ten można interpretować jako wynik konkurencji pomiędzy efektywnym ciśnieniem osmotycznym uwiecznionego rozpuszczalnika a energią kontaktową promującą kolaps łańcuchów w warunkach niekorzystnej solwatacji. Powstająca niejednorodność strukturalna prowadzi do odchylenia od klasycznych przewidywań teorii Flory'ego-Hugginsa i teorii pola samouzgodnionego, szczególnie w reżimie pośrednich gęstości szczepienia i dla dłuższych łańcuchów, gdzie obserwowane są wyraźne efekty niemonotoniczne. Wyniki sugerują również, że rozpuszczalnik w szczotkach o wysokiej gęstości nie pełni jedynie roli medium, w którym znajduje się polimer, lecz staje się aktywnym składnikiem strukturalnym, którego lokalne uwiecznienie może determinować makroskopową odpowiedź warstwy polimerowej. Mechanizm ten stanowi nowy scenariusz reorganizacji szczotek w warunkach złego rozpuszczalnika, wykraczający poza standardowe opisy oparte na jednorodnym obrazie rozcieńczonego lub zagęszczonego polimeru.

[1] W.-L. Chen, R. Cordero, H. Tran, C.K Ober, *Macromolecules* 2017, **50**, 4089.

[2] P. Polanowski, J.K. Jeszka, k. Matyjaszewski, *Macromolecules*, 2023, 56, 2608.

[3] P. Polanowski, A. Sikorski, *Soft Matter* 2021, **17**, 10516.



S07 WS21

Od syntezy do krakingu amoniaku – modelowanie nowoczesnych materiałów katalitycznych

Izabela Kurzydym^{1,2}, Izabela Czekaj^{1,2}

¹Wydział Inżynierii Chemicznej i Technologii, Politechnika Krakowska;

ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków, Polska;

²Interdyscyplinarne Centrum Gospodarki Obiegu Zamkniętego, Politechnika Krakowska;

ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków, Polska;

izabela.kurzydym@pk.edu.pl, izabela.czekaj@pk.edu.pl

Synteza i rozkład amoniaku stanowią kluczowe etapy zamkniętego cyklu amoniak–wodór, a ich efektywność jest w dużej mierze determinowana właściwościami stosowanych materiałów katalitycznych. Zrozumienie zależności pomiędzy strukturą katalizatora, jego właściwościami elektronowymi oraz przebiegiem elementarnych etapów reakcji jest niezbędne do racjonalnego projektowania nowych układów katalitycznych. W tym kontekście teoria funkcjonału gęstości (DFT) stanowi jedno z podstawowych narzędzi współczesnej chemii obliczeniowej, umożliwiające analizę mechanizmów reakcji na poziomie atomowym, identyfikację centrów aktywnych oraz wyznaczanie deskryptorów aktywności katalitycznej.^{1,2}

Szczególną rolę odgrywa nośnik katalizatora, który wpływa na strukturę elektronową fazy aktywnej, stabilność intermediatów oraz bariery energetyczne kolejnych etapów reakcji. Dzięki modelowaniu DFT możliwe jest określenie znaczenia oddziaływań na granicy faz, obecności defektów strukturalnych oraz lokalnego otoczenia centrów aktywnych zarówno w procesach syntezy, jak i rozkładu amoniaku.^{1,3}

Współczesne trendy badawcze wskazują, że połączenie zaawansowanego modelowania molekularnego z badaniami eksperymentalnymi stanowi skuteczne narzędzie projektowania nowych przemysłowych materiałów katalitycznych dla pełnego cyklu amoniak–wodór.^{4,5} Wykorzystanie zaawansowanych technik modelowania, zwłaszcza metod teorii funkcjonału gęstości (DFT), umożliwia prognozowanie właściwości katalizatorów jeszcze przed ich syntezą. Takie podejście znacząco skraca czas opracowywania nowych materiałów oraz przyspiesza wdrażanie wydajnych technologii związanych z produkcją, magazynowaniem i wykorzystaniem wodoru.

Podziękowania

Praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju (NCBR) w ramach międzynarodowego programu CET Partnership, projekt badawczy nr CETP/2023/60/AMAZE/2025, pt. „AmMoniA as a ZERo-carbon fuel and H₂ carrier” („Amoniak jako paliwo bezemisyjne i nośnik wodoru”).

Autorzy składają serdeczne podziękowania polskiej infrastrukturze obliczeń wielkiej skali PLGrid (centra HPC: ACK Cyfronet AGH oraz WCSS) za udostępnienie zasobów obliczeniowych oraz wsparcie techniczne niezbędne do realizacji badań.

Literatura

1. Zeinalipour-Yazdi C.D., Hargreaves J.S.J., Laassiri S., Catlow C.R.A., Royal Society Open Science, 2021, 8, 210952.
2. Varadwaj P.R., Marques H.M., Grabowski I., International Journal of Molecular Sciences, 2025, 26, 4670.
3. Seh Z.W., Kibsgaard J., Dickens C.F. et al., Science, 2017, 355, eaad4998.
4. Yin S.F., Xu B.Q., Zhou X.P., Au C.T., Applied Catalysis A, 2004, 277, 1-9.
5. Cui C., Luo Z., Yao J., CCS Chemistry, 2019, 1, 215-225.



S07 WS22

Transfer ładunku w układach donor–mostek–akceptor.

Charge transfer in donor-bridge-acceptor systems.

Marta Gałyńska^a, Lena Szczuczko^b, Ram Dhari Pandey^b, Julia Szczuczko^b, Katharina Boguslawski^a

^aWydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Gagarina 7, 87-100 Toruń

^bWydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu,
Grudziądzka 5, 87-100 Toruń
marta.galynska@umk.pl

Although charge transfer may appear to be a relatively simple process, involving no formation or cleavage of chemical bonds, but merely the redistribution of electronic charge between different molecular domains, identifying the molecular design factors that promote efficient charge transfer and long-lived charge separation remains challenging. This task becomes particularly complex in systems comprising three functional building blocks such as donor-bridge-acceptor (D-B-A), in which each component must retain its intended function without introducing undesirable trap states along the charge-transfer pathway. The molecular composition of these D, B, and A building blocks, including the identity and position of heteroatoms, can strongly influence their electronic properties.

Selecting an appropriate quantum-chemical method for describing charge-transfer states also presents a significant challenge. Although density functional theory (DFT) is a powerful and readily accessible approach, and excited-state analysis can be conveniently performed using tools such as TheoDOR^[1] the large number of available exchange–correlation functionals makes it difficult to identify one that accurately reproduces the true character of the excited states. Coupled-cluster theory provides an alternative, systematically improvable approach; however, the limited accessibility of transition-density matrices can make detailed excited-state analysis more difficult.

To address this limitation, we have proposed an alternative approach based on the analysis of excited-state eigenvectors projected onto predefined molecular domains or fragments. This projection yields a domain-to-domain charge-transfer matrix containing contributions from both local excitations and interfragment charge-transfer excitations.^[2–6] Here, we investigate how heteroatom doping of the donor and bridge units can either enhance or suppress the charge-transfer character of the excited states in D–B–A systems using the domain-based charge transfer decomposition analysis.^[6,7]

References:

- [1] F. Plasser, *J. Chem. Phys.* 152, (2020), 084108
- [2] P. Tecmer, M. Gałyńska, L. Szczuczko, K. Boguslawski, *J. Phys. Chem. Lett.* 14 (2023), 9909-9917
- [3] L. Szczuczko, M. Gałyńska, M. H. Kriebel, P. Tecmer, K. Boguslawski, *J. Chem. Theory and Comp.*, 21 (2025), 4506-4519
- [4] J. Szczuczko, L. Szczuczko, K. Boguslawski, *Computer Physics Communications*, *In Press*, (2026)
- [5] L. Szczuczko, J. Szczuczko, M. Gałyńska, K. Boguslawski, *J. Phys. Chem. Lett.* 17(22), (2026), 6245–6255
- [6] R. D. Pandey, M. Gałyńska, K. Boguslawski, P. Tecmer, *J. Phys. Chem. A* 130(2), (2025), 446-458
- [7] M. Gałyńska, *In Manuscript*, (2026)



S07 WS23

Monte Carlo calculations of triply excited contributions in dispersion energy

Piotr Żuchowski

*Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu,
Grudziądzka 5, 87-100 Toruń
pzuch@fizyka.umk.pl*

Energia dyspersyjna decyduje o upakowaniu kryształów molekularnych, o wiązaniu ligandów w układach biologicznych oraz o adsorpcji cząsteczek na powierzchniach, a zarazem jest tym składnikiem energii oddziaływania, który teoria funkcjonału gęstości odtwarza najmniej wiarygodnie. Rachunek zaburzeń z adaptacją symetrii (SAPT) daje ją bezpośrednio, jako odrębny składnik energii oddziaływania. Jej dokładne obliczenie jest jednak trudne: jest ona bardzo czuła na korelację wewnątrzmonomerową i skaluje tak jak CCSD(T): N^7 .

Przedstawiamy energię dyspersyjną wyznaczoną z niezależnego od czasu propagatora polaryzacyjnego sprzężonych klastrów (CCPP), w którym odpowiedź monomeru opisana jest na poziomie CCSD. Wąskim gardłem pozostaje poprawka od wzbudzeń potrójnych, najbardziej czasochłonny etap obliczeń, odpowiedzialna niekiedy jednak za 20–30% energii wiązania. Pokazujemy, że można ją wyznaczyć przez próbkowanie Monte Carlo w przestrzeni indeksów orbitalnych: sumowane wyrażenie jest niemal jednoznaczowe, jeżeli wewnętrzne sumowania wykonamy dokładnie, dzięki czemu błąd statystyczny poniżej 1% osiąga się przy niewielkiej liczbie próbek. Wyniki dla małych dimerów bardzo dobrze zgadzają się z wartościami dokładnymi. Omówimy kompleksy, które stają się dzięki temu dostępne obliczeniowo.



Komunikaty sekcyjne



S07 KS01

O projektowaniu cząsteczek z użyciem sztucznej inteligencji chemicznej

Damian Nowak¹, Rafał Bachorz², Marcin Hoffmann¹

¹ Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu; ² Instytut Biologii Medycznej PAN
ul Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;
e-mail mmh@amu.edu.pl

Rozwój sztucznej inteligencji (SI) w ostatnich latach zmienia podejście do projektowania nowych cząsteczek chemicznych. Jednym z kluczowych zastosowań SI w chemii jest predykcja i generowanie struktur molekularnych o określonych właściwościach czy to biologicznych czy to fizykochemicznych, takich jak powinowactwo do wybranych białek, rozpuszczalność czy stabilność metaboliczna [1,2]. W ramach badań nad projektowaniem cząsteczek o określonych cechach biologicznych warto zwrócić uwagę na proponowanie związków wykazującym aktywność chemoprotekcyjną wobec błon komórkowych. Modele sztucznej inteligencji, w tym sieci neuronowe typu encoder-decoder oraz sieci generatywne, zostały wykorzystane do generowania i selekcji struktur chemicznych zdolnych do stabilizacji błony erytrocytów, traktowanej jako dynamiczna granica faz lipidowo-wodnej [2,3]. Uwzględniono kluczowe właściwości fizykochemiczne, takie jak lipofilowość, polaryzowalność i zdolność do tworzenia oddziaływań wodorowych, w celu identyfikacji cząsteczek wzmacniających integralność błon oraz zmniejszających podatność erytrocytów na szok osmotyczny. Wygenerowane cząsteczki analizowano pod kątem ich interakcji z modelowymi błonami lipidowymi oraz wpływu na parametry biochemiczne erytrocytów, przy zastosowaniu predykcyjnych algorytmów uczenia maszynowego. Dzięki zastosowaniu SI możliwe było szybkie wskazanie struktur o najbardziej obiecującym profilu chemoprotekcyjnym, co otwiera nowe możliwości racjonalnego projektowania substancji chroniących błony komórkowe w warunkach stresu oksydacyjnego i mechanicznego [2,3]. Dodatkowo omówione zostanie wykorzystanie AI do przewidywania nadmiaru enancjomerycznego w reakcjach asymetrycznego epoksydowania [4,5]. Modele te, integrując dane eksperymentalne z deskryptorami molekularnymi, umożliwiają unaocznienie rosnącej roli sztucznej inteligencji. Podkreślić należy wyzwania związane z ograniczoną dostępnością dużych, wysokiej jakości zbiorów danych chemicznych, potrzebą zwiększenia zrozumienia modeli predykcyjnych oraz potencjał synergii metod AI z metodami obliczeniowymi chemii kwantowej i eksperymentami laboratoryjnymi.

1. Nowak, D.; Bachorz, R. A.; Hoffmann, M. *IJMS* 2023, 24 (2), 1762. <https://doi.org/10.3390/ijms24021762>.
2. Nowak, D.; Huczyński, A.; Bachorz, R. A.; Hoffmann, M. *Pharmaceuticals* 2024, 17 (2), 173. <https://doi.org/10.3390/ph17020173>.
3. Nowak, D.; Babijczuk, K.; Jaya, L. O. I.; Bachorz, R. A.; Mrówczyńska, L.; Jasiewicz, B.; Hoffmann, M. *IJMS* 2023, 24 (14), 11349. <https://doi.org/10.3390/ijms241411349>.
4. Babijczuk, K.; Berdzik, N.; Nowak, D.; Warżajtis, B.; Rychlewska, U.; Starzyk, J.; Mrówczyńska, L.; Jasiewicz, B. *IJMS* 2024, 25 (10), 5364. <https://doi.org/10.3390/ijms25105364>.
5. Xia, Q.-H.; Ge, H.-Q.; Ye, C.-P.; Liu, Z.-M.; Su, K.-X. *Chem. Rev.* 2005, 105 (5), 1603–1662. <https://doi.org/10.1021/cr0406458>.



S07 KS02

Solvation and resolution matter: benchmarking implicit-solvent and coarse-grained molecular dynamics of DNA and RNA on graphene

P. Miszta, P. Pasznik, S. Niewieczerzal, K. Młynarczk, M. Kawalec, S. Filipek

*Faculty of Chemistry and Biological and Chemical Research Centre, University of Warsaw, Poland
adres korespondencyjny; Wydział Chemii, Pasteura 1, Warszawa
pmfenix@wp.pl*

Understanding how nucleic acids behave at carbon-nanomaterial interfaces such as graphene is an increasingly important but computationally demanding modelling problem. All-atom explicit-solvent molecular dynamics (MD) is the reference standard, yet it becomes prohibitive at the length and time scales of surface-bound systems, motivating implicit-solvent and coarse-grained (CG) approaches whose reliability for nucleic-acid-surface systems remains poorly characterised.

Here we present a systematic benchmark of solvation models and molecular resolutions for representative double-stranded DNA and RNA structures (from the Protein Data Bank) placed on a graphene sheet. All solvation models describe an aqueous (water) environment; the membrane variant (IMM1) is outside the scope of this work. For each system we compare: (i) vacuum; (ii) Generalized Born implicit solvent (GBIS); (iii) an EEF1-type implicit water solvent (COGRIMEN 2.0) [4] in both all-atom and coarse-grained resolutions, using newly derived solvation parameters; (iv) all-atom explicit water (TIP3P) as reference; and (v) the MARTINI coarse-grained force field (version 2 for DNA [1], version 3 for RNA [3] and graphene [2]). Graphene is represented consistently within each framework. Two complementary criteria are assessed: structural stability (backbone RMSD, radius of gyration, base-pairing retention and distance to the graphene surface) and computational efficiency (throughput on identical GPU hardware).

The resulting accuracy-versus-cost map identifies which reduced models preserve near-explicit stability at a fraction of the computational cost, providing practical guidance for large-scale simulation of nucleic acids at carbon-nanomaterial interfaces and validating the COGRIMEN 2.0 framework.

References:

- [1] Uusitalo J.J., Ingolfsson H.I., Akhshi P., Tieleman D.P., Marrink S.J., Martini Coarse-Grained Force Field: Extension to DNA, *J. Chem. Theory Comput.* 2015, 11(8), 3932-3945.
- [2] Shrestha R., Alessandri R., Voge M., Hilpert C., Souza P.C.T., Marrink S.J., Monticelli L., Martini 3 Coarse-Grained Models for Carbon Nanomaterials, *J. Chem. Theory Comput.* 2025.
- [3] Yangaliev D., Ozkan S.B., Coarse-Grained RNA Model for the Martini 3 Force Field, *bioRxiv* 2025.
- [4] Lazaridis T., Karplus M., Effective energy function for proteins in solution (EEF1), *Proteins* 1999, 35, 133-152; Lazaridis T., Effective energy function for proteins in lipid membranes (IMM1), *Proteins* 2003, 52, 176-192.

Acknowledgements: This research was funded by the National Science Centre, Poland, grant OPUS 2025/57/B/ST4/04761.



S07 KS03

Adsorpcja hydrazyny na powierzchni lodu: analiza oddziaływań międzycząsteczkowych na podstawie obliczeń DFT oraz symulacji metodą dynamiki molekularnej według Cara i Parrinello

Paweł Rodziewicz^{1,2}, Marta Polańska², Bernd Meyer¹

¹Interdisciplinary Center for Molecular Materials (ICMM) and Computer Chemistry Center (CCC),
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Nögelsbachstr. 25, 91052 Erlangen, Niemcy

²Instytut Chemii, Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach, Uniwersytecka 7, 25-406 Kielce, Polska
pawel.rodziewicz@ujk.edu.pl

Hydrazyna (N_2H_4) jest powszechnie używana jako reduktor w paliwach do rakiet lub napędach okrętów podwodnych. Właściwości fizykochemiczne hydrazyny zależą od jej struktury elektronowej, w szczególności, od obecności wolnych par elektronowych na atomach azotu. Dynamika zmian konformacyjnych pojedynczej, izolowanej, cząsteczki hydrazyny została bardzo dokładnie przebadana za pomocą symulacji metodą dynamiki molekularnej *ab initio* oraz całkowania po trajektoriach [1]. Hydrazyna jest substancją silnie trującą oraz mutagenną, zaś jej śladowe ilości są obecne, między innymi, w polarnych chmurach stratosferycznych, jako pozostałość po użyciu napędów raketowych.

Przedstawione wyniki badań teoretycznych, za pomocą obliczeń statycznych DFT oraz symulacji metodą dynamiki molekularnej według Cara i Parrinello, dotyczą adsorpcji hydrazyny na powierzchni lodu I_h (0001) zawartego w polarnych chmurach stratosferycznych [2]. Cząsteczka hydrazyny zawiera wiązanie azot-azot, którego trwałość jest kluczowa dla jej reaktywności oraz czasu życia. Szczegółowej analizie poddane zostały oddziaływania międzycząsteczkowe typu hydrazyna-woda, w kontekście zmian parametrów strukturalnych niezbędnych do utworzenia międzycząsteczkowych wiązań wodorowych typu $\text{O}-\text{H}\cdots\text{N}$ oraz $\text{N}-\text{H}\cdots\text{O}$. Przeanalizowana została trwałość kompleksów hydrazyny o różnej stechiometrii, dla których obliczone zostały wartości energii wiązania oraz oddziaływania. Uzyskane lokalne oraz globalne minima energii, pozwoliły na dokładną analizę wyników symulacji metodą dynamiki molekularnej według Cara i Parrinello, gdzie badane były właściwości czasowo-rozdzielcze, takie jak, na przykład, czasy życia utworzonych wiązań wodorowych pomiędzy hydrazyną a cząsteczkami wody z powierzchni lodu.

Podziękowanie: Autorzy dziękują Erlangen Regional Computing Center za czas obliczeniowy.

1. A. Kaczmarek, M. Shiga, D. Marx, J. Phys. Chem. A 2009, 113, 1985
2. P. Rodziewicz, M. Polańska, B. Meyer, ChemPhysChem 2026, 27, e202500825

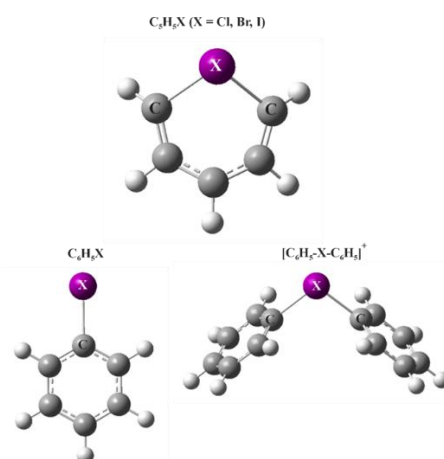
Pseudo-karbeny: nowe związki o cechach kwasu i zasady Lewisa

Mariusz Michalczyk, Wiktor Zierkiewicz

Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Analitycznej i Metalurgii Chemicznej,
 Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław
 mariusz.michalczyk@pwr.edu.pl

Pseudo-karbeny to niedawno wprowadzona do świata nauki¹ nazwa dla związków cyklicznych zawierających hiperwalencyjne atomy halogenu i hipowalencyjne atomy węgla w układzie (HCX)₃, gdzie X = Cl, Br, I. Unikalną cechą tych układów są wiązania C–X, których charakterystyka wymyka się klasycznym definicjom wiązań kowalencyjnych bądź koordynacyjnych. Z tego względu sklasyfikowano je jako „rezonansowe wiązania koordynacyjne σ”¹ o charakterze hybrydowym (kowalencyjno-koordynacyjnym). Obecność dodatniego potencjału elektrostatycznego na atomach halogenów wbudowanych w pierścień sześcioczłonowy, przy jednoczesnym ujemnym potencjale na atomach węgla, sprawia, że układy te są obiecującymi donorami i akceptorami w reakcjach kwasowo-zasadowych Lewisa.

W naszych badaniach skupiliśmy się na dotychczas nieraportowanych cząsteczkach pseudo-karbenów z jednym lub dwoma atomami chloru, bromu lub jodu w pierścieniu. Właściwości otrzymanych halogenowanych heterocykli o wzorze ogólnym C₅H₅X przeanalizowano w kontekście lepiej poznanych układów cyklicznych z atomami 17. grupy: haloarenów oraz pierścieniowych kationów haloniowych. Badane pseudo-karbeny łączą cechy obu tych klas – wykazują obojętny ładunek typowy dla haloarenów, posiadając jednocześnie analogiczny do kationów haloniowych motyw strukturalny dwóch wiązań C–X (Rys. 1).



Rys. 1 Ogólny geometria badanych monomerów. Na górze pseudo karbeny, związki heterocykliczne z atomem halogenu w pierścieniu, na dole po lewej halobenzen, na dole po prawej kation haloniowy, X = Cl, Br, I.

Badania z wykorzystaniem metod obliczeniowych chemii kwantowej pozwoliły na zidentyfikowanie charakterystycznych trendów w strukturze elektronowej analizowanych związków. Wykazano w nich, że badane układy wykazują zdolność do jednoczesnego wiązania zarówno zasad (NH₃), jak i kwasów Lewisa (FCl). Co istotne, w Cambridge Structural Database (CSD) zdeponowana jest obecnie tylko jedna struktura krystaliczna zawierająca zbliżony motyw strukturalny, co stanowiło bezpośrednią inspirację do zaprojektowania modeli teoretycznych użytych w niniejszej pracy. Rozważania rozszerzono również na grupę dihalogenowanych heterocykli o wzorze ogólnym C₄H₄X₂, które również wykazują cechy kwasu jak i zasady Lewisa.

1. S. Kozuch, Angew Chem Int Edit, 2025, 64.



S07 KS05

Mechanizm dehalogenacji chlorometanów katalizowanej F430: perspektywa DFT

Mechanism of F430-Catalyzed Dehalogenations of Chloromethanes: A DFT Perspective

Piotr Paneth, Ye Han

*International Center for Research on Innovative Biobased Materials (ICRI-BioM), Interdisciplinary Doctoral School, Lodz University of Technology, ul. Żeromskiego 116, 90-924 Łódź, Poland
ye.han@dokt.p.lodz.pl*

The widespread industrial use of chlorinated alkanes has led to severe groundwater contamination, necessitating effective environmental remediation strategies. In nature, methanogenic archaea utilizing the corrinoid F430 coenzyme efficiently degrade these pollutants. However, the precise mechanisms governing F430-catalyzed reductive dehalogenation have remained elusive. In this study, we employed Density Functional Theory (DFT) at the MN15-L/def2-TZVP level to investigate the alternative reaction pathways (radical, SN2, and O-SET-D) of chloromethane degradation by F430 and its truncated model, OEt₃BCh. Our thermodynamic and kinetic profiling reveals a definitive mechanistic switch dependent on the degree of substrate chlorination. While lightly chlorinated methanes (CH₃Cl, CH₂Cl₂) favor a classical SN2 pathway, a shift to a radical mechanism occurs for heavily chlorinated species (CHCl₃, CCl₄) due to electrostatic and steric constraints within the catalyst pocket. Furthermore, computed kinetic isotope effects (KIEs) demonstrate that while primary and secondary effects distinguish these pathways, the dual-isotope slope (Δ) is substrate-dependent and not a universal mechanistic indicator.

Praca wykonana/sfinansowana w ramach projektu/grantu: This work was supported by the collaborative grant 2023/48/Q/ST10/00247 from the National Research Council, Poland.

The H_2 molecule in harmonic cylindrical potential: covalent bond in a strong spatial confinement regime

Mikołaj Marciów¹, Wojciech Bartkowiak², Krzysztof Strasburger²

¹Politechnika Wrocławska, Wydział Podstawowych Problemów Techniki. 265488@student.pwr.edu.pl

²Politechnika Wrocławska, Katedra Chemii Fizycznej i Kwantowej

Wyb. Stanisława Wyspiańskiego, 50-370 Wrocław

Based on a series of theoretical studies [1], it has been found that the total energy of atoms and molecular systems subjected to spatial confinement (of a repulsive nature) increases dramatically. The source of this behavior is a significant increase in kinetic energy, which makes a positive contribution to the total energy of molecular systems. In essence, in qualitative terms, the behavior of these systems is described by a simple model of a particle in a potential well. In the case of molecules, even as simple as H_2 , such studies can only be conducted numerically.

A detailed study of the influence of the cylindrical harmonic confining [2] potential on the properties of the hydrogen molecule in its ground state is carried out, for the range of angular frequencies (ω) of the potential up to $\omega = 10$ a.u. Highly accurate electronic wavefunctions are obtained with the variational method, in the basis of explicitly correlated Gaussian functions (ECG) [3]. In comparison to the free molecule, the chemical bond of confined one becomes shorter and stronger. Neither the bond length nor the dissociation energy under strongest considered confinement are influenced considerably by the relativistic effects, although the values of the relativistic energy corrections are large.

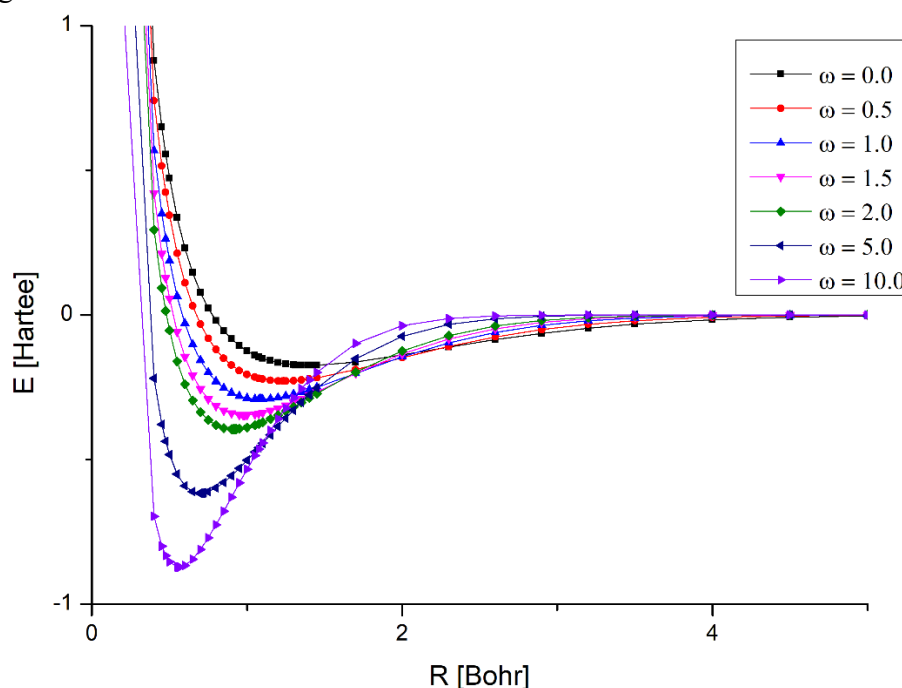


Fig 2: Potential energy curves of confined H_2 molecule

[1]. John R. Sabin and Erkki J. Brändas, editors. Theory of Confined Quantum Systems - Part One, volume 57 of Advances in Quantum Chemistry. Academic Press, 2009.

[2]. Ch. Hättig et al., Chemical Reviews 2012, 112, 4-74.

[3]. J.M.H Lo, et al. Advances Quantum Chemistry 2005, 48, 59-89.



Sesja posterowa



S07 PS01

Solvation and resolution matter: benchmarking implicit-solvent and coarse-grained molecular dynamics of DNA and RNA on graphene

P. Miszta, P. Pasznik, S. Niewieczermal, K. Młynarczk, M. Kawalec, S. Filipek

*Faculty of Chemistry and Biological and Chemical Research Centre, University of Warsaw, Poland
adres korespondencyjny; Wydział Chemii, Pasteura 1, Warszawa
pmfenix@wp.pl*

Understanding how nucleic acids behave at carbon-nanomaterial interfaces such as graphene is an increasingly important but computationally demanding modelling problem. All-atom explicit-solvent molecular dynamics (MD) is the reference standard, yet it becomes prohibitive at the length and time scales of surface-bound systems, motivating implicit-solvent and coarse-grained (CG) approaches whose reliability for nucleic-acid-surface systems remains poorly characterised.

Here we present a systematic benchmark of solvation models and molecular resolutions for representative double-stranded DNA and RNA structures (from the Protein Data Bank) placed on a graphene sheet. All solvation models describe an aqueous (water) environment; the membrane variant (IMM1) is outside the scope of this work. For each system we compare: (i) vacuum; (ii) Generalized Born implicit solvent (GBIS); (iii) an EEF1-type implicit water solvent (COGRIMEN 2.0) [4] in both all-atom and coarse-grained resolutions, using newly derived solvation parameters; (iv) all-atom explicit water (TIP3P) as reference; and (v) the MARTINI coarse-grained force field (version 2 for DNA [1], version 3 for RNA [3] and graphene [2]). Graphene is represented consistently within each framework. Two complementary criteria are assessed: structural stability (backbone RMSD, radius of gyration, base-pairing retention and distance to the graphene surface) and computational efficiency (throughput on identical GPU hardware).

The resulting accuracy-versus-cost map identifies which reduced models preserve near-explicit stability at a fraction of the computational cost, providing practical guidance for large-scale simulation of nucleic acids at carbon-nanomaterial interfaces and validating the COGRIMEN 2.0 framework.

References:

- [1] Uusitalo J.J., Ingolfsson H.I., Akhshi P., Tieleman D.P., Marrink S.J., Martini Coarse-Grained Force Field: Extension to DNA, *J. Chem. Theory Comput.* 2015, 11(8), 3932-3945.
- [2] Shrestha R., Alessandri R., Voge M., Hilpert C., Souza P.C.T., Marrink S.J., Monticelli L., Martini 3 Coarse-Grained Models for Carbon Nanomaterials, *J. Chem. Theory Comput.* 2025.
- [3] Yangaliev D., Ozkan S.B., Coarse-Grained RNA Model for the Martini 3 Force Field, *bioRxiv* 2025.
- [4] Lazaridis T., Karplus M., Effective energy function for proteins in solution (EEF1), *Proteins* 1999, 35, 133-152; Lazaridis T., Effective energy function for proteins in lipid membranes (IMM1), *Proteins* 2003, 52, 176-192.

Acknowledgements: This research was funded by the National Science Centre, Poland, grant OPUS 2025/57/B/ST4/04761.



S07 PS02

Polaryzowalności dipolowe prostych kationów: trendy okresowe i korelacje

Wojciech Tomaszewski, Kajetan Nocuń, Tadeusz Hofman

Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska;
ul. Noakowskiego 3
00-664 Warszawa;
wojciech.tomaszewski.dokt@pw.edu.pl

Przedstawione zostaną wyniki ^[1] obliczeń statycznej polaryzowalności dipolowej 79 prostych kationów w próżni, wykonane za pomocą metody B2GP-PLYP, X2C/ANO-RCC, wraz z porównaniem z innymi wartościami literaturowymi ^[2] ^[3]. Otrzymane wyniki stanowią wewnętrznie spójny zbiór danych. Wskazane zostaną zauważone korelacje z innymi parametrami jonospecyficznymi opisującymi twardość chemiczną i kwasowość Lewisa. Omówione zostaną także periodyczne tendencje polaryzowalności związane z położeniem kationów w układzie okresowym.

- [1] Tomaszewski, W.; Nocuń, K.; Hofman, T. (2026). *Polarizability of 79 monatomic cations in vacuo: Periodic trends and correlations with other ion-specific properties*. *Journal of Computational Chemistry*, w recenzji
- [2] Smith, M.; Khatiwada, R.; Li, P. (2024). *Exploring Ion Polarizabilities and Their Correlation with van der Waals Radii: A Theoretical Investigation*. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 20(19), 8505
- [3] Fraga, S.; Karwowski, J.; Saxena, K. M. S. (Eds.). (1976). *Handbook of Atomic Data*. Amsterdam: Elsevier. (pp. 319-326)



S07 PS03

Od reakcji elementarnych do emergentnych własności sieci reakcyjnych: modelowanie kinetyczne oparte na obliczeniach kwantowo-chemicznych

Róża Okoń^{1,2}, Anna Spyszkiewicz², Rafał Szabla²

¹ Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych Uniwersytetu Warszawskiego;

² Instytut Materiałów Zaawansowanych, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska;

ra.okon@uw.edu.pl

Zrozumienie zachowania złożonych układów chemicznych wymaga wyjścia poza opis pojedynczych reakcji elementarnych i określenia, w jaki sposób mikroskopowy mechanizm reakcji prowadzi do obserwowalnych eksperymentalnie właściwości układu. Budowa predykcyjnych modeli kinetycznych dla takich systemów pozostaje jednak wyzwaniem ze względu na obecność wielu konkurencyjnych ścieżek reakcji, sprzężonych równowag oraz procesów zachodzących w różnych reżimach kinetycznych.

Przedstawiamy podejście do modelowania kinetycznego opartego na obliczeniach kwantowo-chemicznych, zastosowane do złożonej sieci reakcji inspirowanej prebiotyczną chemią aktywacji nukleotydów opisaną przez Liu i współpracowników [1], w której metyloizonitryl pełni rolę chemicznego czynnika aktywującego. Łącząc obliczenia kwantowo-chemiczne energii reakcji z mechanistycznym modelowaniem kinetycznym, konstruujemy sieć reakcji opisującą powstawanie aktywowanych form nukleotydów w różnych warunkach reakcji.

Opracowany model obejmuje około 30 procesów elementarnych, w tym przemiany przebiegające przez bariery energetyczne, równowagi protonacyjne, przemiany konformacyjne oraz etapy kontrolowane dyfuzyjnie. Poprzez przełożenie energii reakcji na poziomie molekularnym na zależne od czasu profile stężeń, podejście to umożliwia bezpośrednie przewidywanie wydajności produktów oraz porównanie ich z obserwacjami eksperymentalnymi.

Pomimo złożoności sieci reakcyjnej oraz niepewności związanej z oszacowaniami energii kwantowo-chemicznych, model odtwarza kluczowe trendy eksperymentalne, w tym względną efektywność różnych warunków aktywacji oraz wpływ pH i stężeń reagentów na powstawanie produktów. Wyniki te pokazują, że modelowanie kinetyczne wspomagane chemią kwantową może dostarczać mechanistycznego wglądu w złożone sieci reakcji oraz łączyć energetykę na poziomie molekularnym z emergentnym zachowaniem układów chemicznych.

[1] Liu et al. Harnessing chemical energy for the activation and joining of prebiotic building blocks. *Nature Chemistry* 2020, 12, 1023-1028.



S07 PS04

Zautomatyzowana procedura obliczeniowa do analizy cząsteczek generowanych przez sieci neuronowe: od smiles do dynamiki molekularnej

Szymon Danielski^{A,Ω}

^A*Instytut Fizyki Politechniki Łódzkiej*

^Ω*Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk*

ul. Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź;

szymon.danielski@cbmm.lodz.pl

W niniejszej pracy przedstawiam zautomatyzowaną, pięcioetapową procedurę obliczeniową przeznaczoną do przeprowadzenia dokowania molekularnego ligand-białko wraz z następującą po nim fazą dynamiki molekularnej dla cząsteczek-ligandów generowanych przez sieci neuronowe w ramach projektowania leków wspomaganego komputerowo (*Computer-Aided Drug Design*). W odróżnieniu od podejść klasycznych, cząsteczki produkowane przez modele generatywne dostarczane są zazwyczaj w postaci ciągów SMILES (lub podobnych) albo grafów molekularnych. Formy takie nie niosą jednak informacji o dokładnej geometrii 3D czy o stanie sprotowania - zaproponowany *workflow* eliminuje tę lukę, przetwarzając równolegle dowolną liczbę wygenerowanych struktur w zautomatyzowany sposób. Zastosowanie prezentowanej procedury pokazane zostanie na przykładzie kandydatów na agonistów receptora 5-HT_{2A}.



S07 PS05

Zastosowanie sferoidalnych funkcji Gaussa w obliczeniach kwantowochemicznych

Jan Dorna, Jacek Komasa

*Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu;
Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań, Polska;
jandor1@st.amu.edu.pl*

Funkcje Gaussa są wykorzystywane w chemii kwantowej od ponad siedmiu dekad. 1-4 Ich największą zaletą jest możliwość analitycznego obliczania potrzebnych całek. Elementy macierzowe hamiltonianu wyznaczane w bazie sferycznych funkcji Gaussa można wyrazić za pomocą funkcji elementarnych, a w przypadku operatora oddziaływania kulombowskiego — funkcji błędu. W prezentowanej pracy na nowo podejmujemy temat zastąpienia funkcji o symetrii sferycznej ich sferoidalnym uogólnieniem.^{5,6} Podejście to prowadzi wprawdzie do zwiększenia złożoności wyrażeń opisujących elementy macierzowe, jednak problematyczne całki oddziaływania kulombowskiego udało się sprowadzić do zamkniętych wzorów analitycznych, niewymagających stosowania kwadratur numerycznych.

Jako układ modelowy wybrano jon molekularny H_2^+ w przybliżeniu Borna–Oppenheimera. Dla tego układu przeprowadzono szeroko zakrojoną optymalizację parametrów nieliniowych funkcji bazowych w celu obiektywnego porównania jakości funkcji sferoidalnych i sferycznych. Analizie poddano dokładność energii stanu podstawowego w funkcji odległości międzyjądrowej oraz rozmiaru bazy. Optymalizację przeprowadzono z wykorzystaniem analitycznych pochodnych energii względem parametrów nieliniowych funkcji bazowych.

Uzyskane wyniki wskazują na potencjał anizotropowych funkcji Gaussa w opisie układów molekularnych. W dalszych badaniach planujemy rozszerzyć analizę na cząsteczki wieloelektronowe.

- [1] S. F. Boys. (1950). *Proceedings of Royal Society, A*, **200**, 542
- [2] A. Meckler. (1953). *Journal of Chemical Physics*, **21** (10), 1750
- [3] S. F. Boys. (1960). *Proceedings of Royal Society, A*, **258**, 402
- [4] K. Singer. (1960). *Proceedings of Royal Society, A*, **258**, 412
- [5] J. V. L. Longstaff, K. Singer. (1960). *Proceedings of Royal Society, A*, **258**, 421
- [6] P. Th. Van Duijnen, D. B. Cook. (1971). *Molecular Physics*, **Vol. 21**, 3 475



S08

Dydaktyka i historia chemii





Wykłady sekcyjne

Stanisław Kostanecki – wybitny chemik i patriota; patron Medalu PTChem

Grzegorz Młostoń*

Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Tamka 12, PL-91-403 Łódź, Poland

e-mail: grzegorz.mloston@chemia.uni.lodz.pl



Prof. Stanisław Kostanecki w trakcie wykładu; Uniwersytet w Bernie (Szwajcaria, ok. 1900)



Delegacja Oddziału Łódzkiego PTChem przy kaplicy Kostaneckich w Kazimierz n. Nerem; na ścianie – tablica pamiątkowa (15.11. 2025)

Profesor Stanisław Kostanecki, patron jednego z głównych Medalii PTChem należał do grona najwybitniejszych chemików europejskich przełomu XIX i XX wieku [1,2]. Obszar jego zainteresowań naukowych obejmował zagadnienia związane z głównymi nurtami ówczesnej chemii organicznej i stosowanej. Były one związane z rozwojem metod syntezy i zastosowaniami nowych barwników oraz ustalaniem struktur znanych barwników pochodzenia naturalnego. Był pionierem badań nad żółtymi barwnikami naturalnymi (chryzyna, kurkumina, etc.). Największe osiągnięcia naukowe i dydaktyczne związane są z jego działalnością na Uniwersytecie w Bernie (Szwajcaria). W literaturze chemicznej znana jest ‘reakcja Kostaneckiego-Robinsona’ (*Kostanecki-Robinson reaction*) [3]. Wprowadził do nomenklatury chemicznej terminy ‘flawony i flawonoidy’. Zapoczątkował też badania strukturalne nad czerwienią koszenili (kwas karminowy), wszechstronnie wykorzystywanym barwnikiem naturalnym [2]. Zmarł mając zaledwie 50 lat w dniu 15.11.1910 r. w Würzburgu (Niemcy). Jego zwłoki zostały sprowadzone przez brata Jana Kostaneckiego i pochowane w rodzinnej kaplicy na cmentarzu w Kazimierzu nad Nerem k. Łodzi. Przy okazji Zjazdu PTChem w Łodzi, w roku 2009, odsłonięto tablicę pamiątkową, umieszczoną na ścianie tej kaplicy. Jako wiodący motyw umieszczono na niej słynne powiedzenie prof. S. Kostaneckiego ‘*Pracujcie w dwojnasób*’; kierował je do swoich studentów, w dużej mierze Polaków, studiujących w Szwajcarii. Medal PTChem im. Stanisława Kostaneckiego za wybitne osiągnięcia w zakresie chemii organicznej jest przyznawany od roku 1978; pierwszym laureatem był prof. Mieczysław Mąkosza (1934-2026).

Literatura:

- [1] G. Młostoń, Patroni Medalii PTChem, *Orbital* **2011**, (1), 7; [2] W. Lampe, *Chemik Polski* **1911**, 11, 26; [3] W. Zerong, Ed. *Comprehensive Organic Name Reactions and Reagents*, J. Wiley 2009.



S08 WS02

Rola barw związków chemicznych w dydaktyce chemii

Wojciech Grochala

*Uniwersytet Warszawski, Centrum Nowych Technologii
Żwirki i Wigury 93, 02-089 Warszawa
w.grochala@cent.uw.edu.pl*

Chemia jest nauką empiryczną a obserwacje zjawisk typu wydzielanie się gazu, powstawanie osadu, zmiana barwy roztworu, powstanie lustra metalicznego, wzrost lub spadek temperatury lub ciśnienia w układzie reakcyjnym, itp., są podstawowymi elementami pozwalającymi na zapamiętywanie przebiegu reakcji chemicznych a z czasem na głębsze rozumienie typów reaktywności. Barwa związków chemicznych, o ile jest charakterystyczna, odgrywa szczególną rolę w dydaktyce chemii gdyż pozwala szybko identyfikować połączenia różnych pierwiastków (szczególnie metali zewnątrz- i wewnątrzprzejściowych) a często także wskazywać na ich stopnie utlenienia lub specyficzne otoczenie ligandów.

W niniejszym wystąpieniu omówię szczególnie wdzięczny przypadek tlenków metali przejściowych na ich najwyższych stopniach utlenienia (zawierających kationy izoelektronowe), gdzie za pomocą analizy barw można łatwo połączyć kolor związku z jego przerwą pasmową, cechami kwasowo-zasadowymi, właściwościami redox, stabilnością termiczną, kowalencyjnością/ionowością wiązań chemicznych oraz opisem teoretycznym takich układów [1]. Analizę taką można uogólnić na inne klasy związków chemicznych. To jakościowe podejście pozwala także przewidywać cechy układów jeszcze nauce nieznanych, co zostanie zademonstrowane na przykładzie FeO_4 .

[1] Grochala W, Watch the colours – or about qualitative thinking in chemistry, FOUND CHEM 23(1): 41–58 2021



S08 WS03

Szkolna nomenklatura chemiczna: Co nowego w poradniku dla nauczycieli?

Paweł Bernard

*Zakład Dydaktyki Chemii, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
pawel.bernard@uj.edu.pl*

Nomenklatura chemiczna stanowi podstawowy składnik języka chemii, lecz jej nauczanie pozostaje źródłem istotnych trudności dydaktycznych. Wielość równolegle funkcjonujących systemów nazewnictwa, zmieniające się rekomendacje IUPAC, obecność nazw zwyczajowych oraz rozbieżności między terminologią szkolną, akademicką, prawną i stosowaną w życiu codziennym utrudniają nauczycielom wybór nazw odpowiednich dla danego etapu kształcenia. Celem powstałego poradnika dla nauczycieli jest dostarczenie nauczycielom szkół podstawowych i ponadpodstawowych praktycznego, spójnego i dostosowanego do polskich realiów edukacyjnych przewodnika po nomenklaturze chemicznej. Publikacja ma wspierać precyzyjne i jednoznaczne komunikowanie treści chemicznych, a równocześnie chronić uczniów przed nadmiernym formalizmem oraz terminologią nieadekwatną do ich poziomu rozwoju i rzeczywistych potrzeb edukacyjnych.

W odniesieniu do chemii nieorganicznej rekomendujemy zachowanie sprawdzonych zasad stosowanych w polskiej szkole, przy jednoczesnym uwzględnianiu nazw zwyczajowych rozpowszechnionych w nauce, prawodawstwie i praktyce. Takie stanowisko wynika z braku jednolitego systemu nazw nieorganicznych, nieobecności polskiego przekładu rekomendacji IUPAC z 2005 [1] roku oraz niewielkiego rozpowszechnienia części najnowszych nazw systematycznych. W obszarze chemii organicznej publikacja łączy aktualne zalecenia IUPAC [2] z polską tradycją terminologiczną, rozszerzając omówienie o reprezentację struktur, izomerię, stereochemię oraz nazewnictwo związków istotnych w nauczaniu biologii.

Opracowanie zawiera rekomendacje, ale nie ustanawia zamkniętego katalogu jedynie poprawnych nazw. Jego zasadniczą ideą jest wyposażenie nauczycieli w narzędzia umożliwiające świadomy wybór terminologii, objaśnianie nazw alternatywnych oraz kształtowanie u uczniów kompetencji posługiwania się językiem chemicznym w sposób poprawny, funkcjonalny i osadzony w kontekście. Wystąpienie ukaże ponadto, w jaki sposób proponowane rozwiązania mogą ograniczać niespójności między podręcznikami, wymaganiami egzaminacyjnymi i praktyką komunikacyjną.

Literatura

1. Connelly, N. G.; Damhus, T. *Nomenclature of Inorganic Chemistry (IUPAC Recommendations 2005)*; 2005.
2. Favre, H. A.; Powell, W. H. *Nomenclature of Organic Chemistry: IUPAC Recommendations and Preferred Names 2013*; The Royal Society of Chemistry, 2013.



S08 WS04

Ta sama chemia, inna dydaktyka: od transmisji wiedzy do konstruowania rozwiązań problemów środowiskowych

Aleksandra Zahorska

*Zakład Dydaktyki i Popularyzacji Nauki, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański;
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk;
aleksandra.zahorska@ug.edu.pl*

W tradycyjnej organizacji edukacji chemicznej przyjmuje się, że student powinien najpierw opanować wiedzę teoretyczną, aby móc ją zastosować: przewidywać przebieg zjawisk, planować eksperymenty i wyjaśniać zależności przyczynowo-skutkowe. Takie podejście może przesłaniać fakt, że formułowanie przypuszczeń, zadawanie pytań, poszukiwanie zależności i rozważanie rozwiązań mogą poprzedzać opanowanie wiedzy naukowej i uczestniczyć w jej budowaniu. Celem wystąpienia jest przedstawienie odmiennej logiki projektowania edukacji chemicznej, w której punktem wyjścia staje się problem, a nie przekaz gotowej teorii. Kontekst stanowi zagadnienie obecności pozostałości farmaceutyków w wodzie oraz badania nad ich usuwaniem z wykorzystaniem samopływających materiałów fotokatalitycznych. Zagadnienie posłuży do porównania organizacji wiedzy i aktywności uczących się w perspektywie obiektywistycznej, konstruktywistyczno-interpretatywnej i transformatywnej. Analiza obejmie umiejętności poznawcze i badawcze uruchamiane przez uczestników w zależności od przyjętego modelu dydaktycznego. Pozwoli to pokazać, że o paradygmatycznym charakterze zajęć nie przesądza wybór tematu ani obecność doświadczenia, ale sposób wykorzystania problemu i aktywności uczestników. W takim ujęciu wiedza chemiczna nie jest wyłącznie warunkiem podjęcia rozumowania, lecz może być budowana, weryfikowana i porządkowana dzięki temu procesowi.



Projekt współfinansowany przez Narodową Agencję Wymiany Akademickiej (nr BPN/BCH/2025/00023/00001 – kierownik projektu prof. dr hab. Ewa Siedlecka) oraz Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach funduszu DS 531-T130-D507-26.



S08 WS05

Wirtualna pracownia chemiczna – nowy standard kształcenia

Julia Kłak¹, Alina Bieńko¹

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



Chemia jest nauką eksperymentalną, której podstawę stanowią obserwacja zjawisk i samodzielne wykonywanie doświadczeń. Współczesne szkolnictwo wyższe stoi jednak przed nowymi wyzwaniami. Coraz więcej studentów rozpoczyna studia z ograniczonym doświadczeniem laboratoryjnym, a jednocześnie rosną wymagania dotyczące bezpieczeństwa pracy oraz koszty prowadzenia laboratoriów dydaktycznych.

Powstaje zatem pytanie, czy możliwe jest skuteczne przygotowanie studenta do pracy laboratoryjnej jeszcze przed wejściem do rzeczywistego laboratorium. Odpowiedzią na te wyzwania może być wykorzystanie technologii wirtualnej rzeczywistości (VR), która staje się ważnym elementem nowoczesnej edukacji akademickiej.

Na Wydziale Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego rozpoczęto wdrażanie systemu **Empiriusz 2.0**, którego celem jest utworzenie **Wirtualnej Pracowni Chemicznej** wspierającej kształcenie studentów oraz przyszłych nauczycieli chemii. Technologia VR tworzy immersyjne środowisko, w którym student aktywnie uczestniczy w procesie eksperymentalnym – przygotowuje stanowisko pracy, dobiera odczynniki i aparaturę, wykonuje doświadczenie oraz analizuje jego przebieg. Możliwość wielokrotnego powtarzania eksperymentów bez zużywania odczynników i ryzyka dla użytkownika sprzyja skuteczniejszemu rozwijaniu kompetencji praktycznych. Istotnym elementem systemu jest również moduł bezpieczeństwa i pierwszej pomocy, umożliwiający naukę zasad BHP, organizacji pracy laboratoryjnej oraz postępowania w sytuacjach awaryjnych. Możliwość wielokrotnego przećwiczenia procedur w środowisku wirtualnym pozwala budować prawidłowe nawyki jeszcze przed rozpoczęciem pracy w laboratorium rzeczywistym. Technologia VR pełni również ważną rolę w kształceniu nauczycieli chemii. Studenci uczą się projektowania zajęć wykorzystujących nowoczesne technologie, przygotowują scenariusze lekcji zgodne z założeniami edukacji STEM oraz poznają metody aktywizujące uczniów poprzez eksperyment. Dzięki temu zdobywają kompetencje niezbędne we współczesnej szkole, w której technologie cyfrowe stają się naturalnym elementem procesu dydaktycznego.

Pierwsze doświadczenia dydaktyczne wskazują na wzrost zaangażowania studentów, lepsze zrozumienie zagadnień eksperymentalnych oraz większą świadomość zasad bezpiecznej pracy w laboratorium. Studenci czują się pewniej podczas wykonywania doświadczeń, rzadziej popełniają błędy i są lepiej przygotowani do pracy laboratoryjnej.

Należy jednak podkreślić, że wirtualna rzeczywistość nie stanowi alternatywy dla tradycyjnego laboratorium chemicznego, lecz jego wartościowe uzupełnienie. Nie jest chwilowym trendem, lecz elementem transformacji współczesnej edukacji akademickiej. Podobnie jak platformy e-learningowe czy narzędzia sztucznej inteligencji, staje się kolejnym komponentem nowoczesnego środowiska dydaktycznego. Łącząc nowoczesne technologie z klasycznym eksperymentem, umożliwia rozwój kompetencji praktycznych, cyfrowych i metodycznych. Doświadczenia Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego pokazują, że **Wirtualna Pracownia Chemiczna** może stać się jednym z elementów nowego standardu kształcenia chemików i nauczycieli, zwiększając efektywność procesu dydaktycznego oraz atrakcyjność studiów chemicznych.



Komunikaty sekcyjne



S08 KS01

Chemia pełną parą – STEAM w praktyce edukacyjnej

Małgorzata Krzeczowska

Zakład Dydaktyki Chemii, Wydział Chemii UJ, Kraków

*adres korespondencyjny;
malgorzata.krzeczowska@uj.edu.pl*

Współczesna dydaktyka chemii stoi przed wyzwaniem odejścia od modelu opartego przede wszystkim na przekazywaniu wiedzy na rzecz kształcenia rozwijającego samodzielność poznawczą, kreatywność oraz kompetencje niezbędne do funkcjonowania w dynamicznie zmieniającym się świecie. Celem wystąpienia jest przedstawienie praktycznych możliwości wykorzystania podejścia STEAM w codziennej pracy nauczyciela chemii na poziomie szkoły podstawowej i ponadpodstawowej.

Proponowane rozwiązania zostaną osadzone w założeniach konstrukttywizmu i konektywizmu, zgodnie z którymi uczeń aktywnie konstruuje wiedzę, korzysta z różnorodnych źródeł informacji oraz uczy się poprzez współpracę, eksperymentowanie i refleksję nad własnym działaniem. W takim modelu staje się uczestnikiem procesu badawczego: formułuje pytania i hipotezy, projektuje sposoby ich weryfikacji, podejmuje decyzje oraz analizuje uzyskane wyniki, w tym również błędy i niepowodzenia. Nauczyciel pełni natomiast funkcję projektanta środowiska uczenia się, moderatora dociekania naukowego oraz osoby zapewniającej adekwatne rusztowanie dydaktyczne.

Włączenie komponentu artystycznego pozwala dodatkowo rozwijać wyobraźnię, kreatywność i umiejętność przedstawiania wiedzy chemicznej za pomocą modeli, obrazów, narracji oraz innych form reprezentacji. Podczas wystąpienia zaprezentowane zostaną przykłady aktywności łączących eksperyment chemiczny, projektowanie, technologię, analizę danych i twórcze rozwiązywanie problemów.

Wystąpienie ma charakter praktyczno-wdrożeniowy. Jego rezultatem będzie zestaw inspiracji i rozwiązań możliwych do bezpośredniego wykorzystania w edukacji chemicznej, wspierających rozwój myślenia analitycznego, kompetencji cyfrowych, współpracy i samodzielności uczniów.



S08 KS02

Młodzieżowe Towarzystwo Chemiczne – nowa, stara idea

Ireneusz Maciej Habierka

32-340 Wolbrom, Zabagnie ul. Czarnoleska 1
imh@poczta.fm

MTChem – Młodzieżowe Towarzystwo Chemiczne, zamysł który rozwijał się powoli od wielu lat, zasygnalizowany został na Zjeździe w Poznaniu w 2016 roku. Jego pierwowzorem była działalność autora komunikatu w Młodzieżowym Towarzystwie Naukowym (MTN) w Katowicach, gdzie przez pewien czas kierował Sekcją Chemiczną (koniec lat 70 XX wieku).

Jak wiadomo, w przestrzeni publicznej funkcjonują wartościowe vlogi, blogi oraz liczne formy bezpośredniej pracy z uczniami, prowadzone przez uczelnie i szkoły, jak również niezależnych chemików. Należy wyraźnie podkreślić, że podczas Zjazdów PTChem prezentowane są na Sekcji Dydaktyki, różnorodne, bardzo ciekawe metody pracy z uczniami zainteresowanymi chemią.

Czy w takim razie, jest sens powołania MTChem? Autor uważa, że stanowczo TAK.

Tego typu organizacje, o ogólnokrajowym zasięgu, pozwalają młodzieży na ukierunkowanie zainteresowań, wymianę doświadczeń i nobilitację, poprzez przynależność do stowarzyszenia o charakterze wybitnie naukowym, ze wszystkimi jego atrybutami (legitymacje, odznaki, sekcje itd.).

W założeniu MTChem byłby zależny od PTChem i podlegał pod Prezesa (Zarząd).

Bardzo ważne jest to, że MTChem w żaden sposób nie byłby konkurencyjny dla istniejących inicjatyw dotyczących rozwoju młodych chemików. Wręcz przeciwnie, byłby on pomostem dla najbardziej aktywnych beneficjentów tychże programów do przyszłego członkostwa w PTChem, i co jest oczywiste, do pracy naukowej.

Należy jednak zdawać sobie sprawę, że powstanie i działalność MTChem, będzie rzeczą wyjątkowo trudną i logistycznie bardziej skomplikowaną niż działalność PTChem. Wynika to z wieku uczestników, co wiąże się z ich niewielką decyzyjnością, brakiem niezależności finansowej i potrzebą dużego zaangażowania ze strony nadzorujących osób dorosłych.

Podsumowując, powstanie Młodzieżowego Towarzystwa Chemicznego wymagałoby zespołowej, ciężkiej i długofalowej pracy prawdziwych pasjonatów chemii z zacięciem dydaktycznym. Niebagatelne znaczenie miałby tu pozytywny stosunek Sekcji Dydaktyki Chemii, która skupia właśnie tego typu ludzi.



S08 KS03

Jak zainteresować uczniów chemią: Podsumowanie projektu „Odkrywaj z nami chemię”

Mária Babinčáková, Paweł Bernard

*Zakład Dydaktyki Chemii, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
maria.babincakova@uj.edu.pl, pawel.bernard@uj.edu.pl*

Projekt „Odkrywaj z nami chemię”, realizowany w latach 2024-2026 przez Zakład Dydaktyki Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, stanowi przykład kompleksowych działań popularyzujących nauki przyrodnicze oraz wzmacniających współpracę pomiędzy szkołami a środowiskiem akademickim. Jego głównym celem jest rozwijanie zainteresowania uczniów chemią i pracą badawczą, kształtowanie pozytywnego wizerunku nauki oraz umożliwienie młodzieży bezpośredniego kontaktu z nowoczesnym zapleczem laboratoryjnym uczelni. Grupę docelową projektu stanowią uczniowie klas ósmych szkół podstawowych oraz uczniowie klas trzecich szkół ponadpodstawowych realizujących chemię w zakresie rozszerzonym.

Istotnym wyróżnikiem przedsięwzięcia jest zastosowanie metody Inquiry-Based Education (IBE), czyli nauczania opartego na samodzielnym dociekaniu wiedzy. Podczas zajęć uczniowie nie są jedynie odbiorcami gotowych treści, lecz wcielają się w rolę badaczy. Formułują pytania badawcze i hipotezy, projektują sposób rozwiązania problemu, przeprowadzają doświadczenia, analizują wyniki oraz wyciągają wnioski. Takie podejście pozwala rozwijać nie tylko wiedzę chemiczną, ale również kompetencje badawcze, umiejętność krytycznego myślenia i pracy zespołowej.

W ramach projektu uczniowie uczestniczą w cyklu trzech warsztatów laboratoryjnych realizowanych w laboratoriach Wydziału Chemii UJ. Zajęcia prowadzone są przez doświadczonych pracowników dydaktycznych i naukowo-dydaktycznych, natomiast za koordynację i poprawność metodyczną odpowiadają specjaliści z Zakładu Dydaktyki Chemii UJ posiadający doświadczenie w edukacji opartej na samodzielnym odkrywaniu wiedzy przez uczniów. Tematyka warsztatów została powiązana zarówno z podstawą programową, jak i z praktycznymi zastosowaniami chemii w życiu codziennym oraz gospodarce. Uczniowie szkół podstawowych realizują zajęcia poświęcone rozdzielaniu mieszanin, elementom zielonej chemii i zrównoważonego rozwoju oraz reakcjom strącaniowym. Z kolei dla uczniów szkół ponadpodstawowych przygotowano warsztaty dotyczące działania emulgatorów, reakcji kwasowo-zasadowych oraz procesów utleniania i redukcji. Tematy te osadzono w kontekście technologii wykorzystywanych m.in. w przemyśle kosmetycznym, farmaceutycznym, spożywczym czy lakierniczym, a na poziomie ponadpodstawowym wzbogacono je również o odniesienia do aktualnych problemów badawczych współczesnej chemii.

Wystąpienie stanowi podsumowanie dotychczasowej realizacji projektu. Omówione zostaną jego założenia dydaktyczne, organizacja zajęć, przykłady wykonywanych przez uczniów eksperymentów, wykorzystywane materiały dydaktyczne, doświadczenia związane z realizacją projektu oraz wnioski dotyczące roli współpracy uczelni ze szkołami w popularyzacji nauki.

Podziękowanie: Projekt „Odkrywaj z nami chemię” uzyskał dofinansowanie ze środków budżetu państwa w ramach programu Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego pod nazwą „Nauka dla Społeczeństwa II” nr projektu NdS-II/SP/0079/2024/01 kwota dofinansowania 999 900,00 zł stanowiąca całkowitą wartość projektu.



S08 KS04

Praca z uczniem zdolnym. Indywidualne ścieżki rozwoju realizowane w amerykańskim systemie nauczania.

Emilia Wróbel

*II Liceum Ogólnokształcące im. Marii Skłodowskiej – Curie w Gorzowie Wielkopolskim;
ul. Przemysłowa 22, 66-400 Gorzów Wielkopolski;
emilianapierala1@wp.pl*

Współczesna edukacja wymaga odejścia od systemowych schematów na rzecz głębokiej personalizacji procesu uczenia się. Niniejsza prezentacja stanowi studium przypadku i praktyczny przewodnik po systemie wsparcia ucznia zdolnego, realizowanym w II Liceum Ogólnokształcącym w Gorzowie Wielkopolskim. Przedstawiona zostanie specyfika pracy z młodzieżą o wybitnym potencjale, koncentrując się na metodach trafnej diagnozy ukrytych talentów i mechanizmach ich rozwijania w szkolnej codzienności.

Głównym punktem wystąpienia będzie omówienie założeń i funkcjonowania Indywidualnych Ścieżek Rozwoju (ISR) w kontekście formalno-prawnym oraz procedur oceniania postępów. Model ten, czerpiąc inspirację z amerykańskiej koncepcji „Customized Learning”, stawia na elastyczność, interdyscyplinarność oraz autonomię wyboru ucznia. W tym ujęciu kluczowej zmianie ulega rola pedagoga, który przestaje być wyłącznie wykładowcą, a staje się tutorem i mentorem towarzyszącym młodemu człowiekowi w procesie badawczym.

Podczas prezentacji zostaną omówione konkretne narzędzia dydaktyczne i motywacyjne, w tym tworzenie autorskich programów nauczania, wdrażanie rygorystycznych standardów akademickich Advanced Placement (AP), realizacja niezależnych projektów badawczych oraz innowacyjny system kredytowy punktujący pracę własną ucznia. Całość systemu dopełnia prezentacja budowania efektywnej sieci wsparcia poprzez strategiczną współpracę z uczelniami wyższymi i partnerami zewnętrznymi.



S08 KS05

Możliwości, błędy i dobre praktyki wykorzystania AI na lekcjach chemii

Michał Turkowicz

*XI Liceum Ogólnokształcące im. rtm. Witolda Pileckiego w Białymstoku;
ul. Grottgera 9 15-225 Białystok;
turkowicz@gmail.com*

Generatywna sztuczna inteligencja coraz częściej wspiera nauczycieli w przygotowywaniu scenariuszy lekcji, kart pracy, quizów, zadań maturalnych, informacji zwrotnej oraz materiałów dostosowanych do zróżnicowanych potrzeb uczniów [1]. Nie oznacza to jednak, że narzędzia AI „znają” chemię w sposób porównywalny z nauczycielem. Modele językowe generują odpowiedzi na podstawie rozpoznanych wzorców, dlatego mogą tworzyć treści przekonujące językowo, lecz zawierające błędne wzory, równania reakcji, obliczenia, nazwy związków, jednostki lub warunki prowadzenia doświadczeń [2].

Podczas wystąpienia przedstawione zostaną przykłady poprawnych i błędnych odpowiedzi AI oraz praktyczne zastosowania tej technologii w nauczaniu chemii [3], w tym w przygotowaniu do egzaminu maturalnego. Omówione zostaną również zasady konstruowania skutecznych promptów, procedura weryfikacji materiałów oraz kwestie bezpieczeństwa, prywatności i odpowiedzialności [4], [5]. Głównym wnioskiem jest konieczność traktowania AI jako asystenta wspierającego pracę nauczyciela i rozwijającego krytyczne myślenie uczniów, a nie jako nieomylnego źródła wiedzy chemicznej.

[1] Łakocka, A., Zahorska, A., Kumirska, J. (2026). Modele chemiczne tworzone przez AI – wsparcie dla uczniów mających trudności z abstrakcją. „Wiadomości Chemiczne”, 80(5–6), 895–912. DOI: 10.53584/WIADCHEM.2026.05.3

[2] Clark, T. M., Anderson, E., Dickson-Karn, N. M., Soltanirad, C., Tafini, N. (2023). Comparing the Performance of College Chemistry Students with ChatGPT for Calculations Involving Acids and Bases. „Journal of Chemical Education”, 100(10), 3934–3944. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.3c00500>

[3] Bieńkowska, M. (2025). Współczesne trendy w metodyce nauczania przedmiotów przyrodniczych. Zajęcia warsztatowe. Warszawa: Ośrodek Rozwoju Edukacji. ISBN 978-83-67366-95-3.

[4] Yuriev, E., Wink, D. J., Holme, T. A. (2024). The Dawn of Generative Artificial Intelligence in Chemistry Education. „Journal of Chemical Education”, 101(8), 2957–2959.

[5] Dąbrowska, U., Krasnodębska, A., Kuś, J., Plichta, P., Pyżalski, J., Rogowiecki, J., Witkowska, M. (2026). AI w szkole. Od algorytmu do relacji. Warszawa: NASK – Państwowy Instytut Badawczy. ISBN 978-83-68356-60-1.



S08 KS06

Nauczanie chemii w programie IB Diploma Programme i w polskim liceum ogólnokształcącym – analiza porównawcza

Tomasz Korzeniak

VI Liceum Ogólnokształcące im. Adama Mickiewicza w Krakowie, ul. Wąska 7, 31-059 Kraków;

e-mail : t.korzeniak@vilo.krakow.pl

Rosnąca liczba szkół samorządowych w Polsce, w tym VI Liceum Ogólnokształcące w Krakowie, wprowadza do swojej oferty International Baccalaureate Diploma Programme (IB DP), zwiększając tym samym dostępność kształcenia zakończonego uzyskaniem dyplomu matury międzynarodowej. Dwuletni program IB DP jest realizowany w trzeciej i czwartej klasie liceum ogólnokształcącego, po dwóch latach nauki prowadzonej zgodnie z wymaganiami polskiego systemu edukacji.

Celem wystąpienia jest porównanie nauczania chemii w programie IB DP oraz w tradycyjnym liceum ogólnokształcącym. Analizie zostaną poddane różnice dotyczące zakresu i organizacji treści kształcenia, sposobu planowania pracy dydaktycznej, wykorzystywanych metod nauczania oraz roli doświadczenia chemicznego w procesie uczenia się. Szczególna uwaga zostanie zwrócona na charakterystyczne dla programu IB podejście problemowe i badawcze, zakładające większą samodzielność ucznia w projektowaniu eksperymentów, analizowaniu danych, formułowaniu wniosków oraz krytycznej ocenie pozyskiwanych informacji.

Przedstawione zostaną przykłady rozwiązań stosowanych podczas lekcji chemii, a także porównanie układu, zakresu i sposobu realizacji wybranych treści programowych w obu systemach. Omówione zostaną również zasady oceniania osiągnięć uczniów, ze szczególnym uwzględnieniem elementów specyficznych dla IB DP, takich jak Internal Assessment oraz Extended Essay, które nie mają bezpośrednich odpowiedników w polskim systemie egzaminacyjnym.

Prezentowane zestawienie pozwoli wskazać zarówno zasadnicze różnice pomiędzy analizowanymi modelami kształcenia, jak i rozwiązania dydaktyczne programu IB, które mogą stanowić inspirację dla nauczycieli chemii pracujących w polskich szkołach.



S08 KS07

Doskonalenie warsztatu pracy przyszłego nauczyciela chemii - od współprowadzenia zajęć do praktycznego egzaminu z dydaktyki chemii

Anna Makowska, Agnieszka Siporska

*Uniwersytet Warszawski Wydział Chemii,
milew@chem.uw.edu.pl, asipor@chem.uw.edu.pl*

Kiedy osoba przygotowująca się do zawodu nauczyciela powinna poprowadzić pierwszą samodzielną lekcję?

W wystąpieniu zostanie przedstawiony model kształcenia oparty na współpracy Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego ze szkołami podstawowymi i ponadpodstawowymi, w którym studenci aktywnie uczestniczą w organizacji i realizacji zajęć dla uczniów. Istotnym elementem prezentowanego modelu jest mentoring oparty na współpracy absolwentów uczelni z przyszłymi nauczycielami chemii. Nauczyciele, którzy ukończyli studia na Wydziale Chemii UW i obecnie uczą chemii, wracają na uczelnię wraz ze swoimi uczniami stając się mentorami dla kolejnego pokolenia studentów. Tworzy się w ten sposób naturalna przestrzeń wymiany doświadczeń między nauczycielami praktykami, studentami i pracownikami akademickimi.

Podczas wystąpienia pokazane zostaną przykłady zajęć, w ramach których studenci przygotowują i współprowadzą lekcje laboratoryjne oraz wykorzystują autorskie gry dydaktyczne wspomagające nauczanie. Prowadzą one do stopniowego doskonalenia warsztatu pracy przyszłego nauczyciela chemii poprzez praktyczne doświadczenia dydaktyczne od obserwacji poprzez współorganizowanie zajęć aż do praktycznego egzaminu polegającego na samodzielnym przeprowadzeniu lekcji z eksperymentem chemicznym.



S08 KS08

Innowacyjne metody wspierania dzieci i młodzieży z ASD – projekt „Jestem ZA wiedzą” realizowany na Politechnice Krakowskiej

Agnieszka Łapczuk

Politechnika Krakowska im. T. Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Katedra Chemii i Technologii Organicznej

ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków

agnieszka.lapczuk@pk.edu.pl.

Osoby ze spektrum autyzmu (ASD) często wykazują ponadprzeciętne zainteresowania i wysoki potencjał poznawczy, jednak oferta edukacji pozaformalnej rzadko odpowiada na ich potrzeby rozwojowe, zwłaszcza w przypadku młodzieży i młodych dorosłych. Odpowiednio zaprojektowane zajęcia mogą nie tylko rozwijać wiedzę i zainteresowania uczestników, ale również wspierać kompetencje społeczne, komunikacyjne oraz budowanie pewności siebie.

W prezentacji przedstawiono założenia oraz doświadczenia z realizacji projektu „Jestem ZA wiedzą”, prowadzonego na Politechnice Krakowskiej. Projekt opierał się na interdyscyplinarnym podejściu do edukacji pozaformalnej z wykorzystaniem metody STEAM (Science, Technology, Engineering, Arts, Mathematics), łączącej nauki ścisłe, techniczne i sztukę z aktywnym uczestnictwem w procesie poznawczym. Zajęcia realizowano w środowisku akademickim, wykorzystując potencjał laboratoriów oraz doświadczenie pracowników naukowych, a ich program dostosowywano do możliwości, wieku i zainteresowań uczestników. Zajęcia były prowadzone w małych grupach, ze wsparciem asystenta.

Istotnym elementem projektu było kompleksowe podejście do wsparcia osób z ASD poprzez objęcie działaniami nie tylko dzieci, lecz także młodzieży, osób dorosłych oraz ich rodzin. Program obejmował warsztaty edukacyjne, zajęcia rozwijające kompetencje społeczne i samodzielność, aktywności wspierające rozwój psychofizyczny oraz działania integracyjne. Takie rozwiązanie pozwoliło stworzyć przestrzeń sprzyjającą zarówno zdobywaniu wiedzy, jak i wzmacnianiu relacji rodzinnych oraz społecznych.

Doświadczenia z realizacji projektu wskazują, że edukacja pozaformalna oparta na metodzie STEAM stanowi skuteczne narzędzie wspierające rozwój osób ze spektrum autyzmu. Uczestnictwo w zajęciach sprzyja rozwijaniu zainteresowań, zwiększa motywację do nauki, wzmacnia poczucie własnej wartości oraz ułatwia funkcjonowanie w grupie. Zaprezentowany model może stanowić inspirację do tworzenia podobnych inicjatyw wykorzystujących potencjał uczelni wyższych w działaniach na rzecz edukacji włączającej.



Sesja posterowa



S08 PS01

Badanie stabilności emulsji: warsztat dla uczniów szkół ponadpodstawowych

Paweł Bernard, Mária Babinčáková, Monika Brzostowicz,

Joanna Hetmańczyk, Elżbieta Szostak

*Zakład Dydaktyki Chemii, Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
pawel.bernard@uj.edu.pl*

Emulsje są powszechnie wykorzystywane zarówno w przemyśle, jak i w życiu codziennym, jednak zrozumienie procesów odpowiedzialnych za ich powstawanie i stabilność często stanowi wyzwanie dla uczniów. Prezentowany poster przedstawia jeden z warsztatów realizowanych w ramach projektu „Odkrywaj z nami chemię”, prowadzonego w latach 2024-2026 przez Zakład Dydaktyki Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego. Projekt ma na celu rozwijanie zainteresowania młodzieży chemią, kształtowanie kompetencji badawczych oraz umożliwienie uczniom bezpośredniego kontaktu z nowoczesnym zapleczem laboratoryjnym uczelni.

Warsztat poświęcony emulsjom został opracowany dla uczniów szkół ponadpodstawowych i wykorzystuje założenia Inquiry-Based Education (IBE), czyli nauczania opartego na samodzielnym odkrywaniu wiedzy. Uczniowie, pracując w laboratorium, przechodzą od prostych doświadczeń badających stabilność układów emulsyjnych do samodzielnego projektowania i przygotowywania funkcjonalnych kremów kosmetycznych. W trakcie zajęć realizują uporządkowaną procedurę eksperymentalną, przygotowując różne rodzaje emulsji oraz analizując wpływ emulgatorów i innych czynników na ich właściwości fizykochemiczne i trwałość. Formułują hipotezy, interpretują wyniki doświadczeń oraz wyciągają wnioski dotyczące mechanizmów stabilizacji układów emulsyjnych.

Kulminacyjnym etapem warsztatu jest opracowanie spersonalizowanych kremów kosmetycznych, co pozwala na bezpośrednie powiązanie wiedzy laboratoryjnej z technologiami stosowanymi w przemyśle kosmetycznym oraz z produktami obecnymi w codziennym życiu. Takie podejście sprzyja lepszemu zrozumieniu praktycznych zastosowań chemii oraz zwiększa atrakcyjność zajęć dla uczestników.

Skuteczność proponowanej metody oceniono na podstawie testów wiedzy przeprowadzanych przed i po zakończeniu zajęć. Wyniki wykazały statystycznie istotny wzrost poziomu wiedzy teoretycznej uczestników. Dodatkowo możliwość zachowania samodzielnie wykonanych produktów okazała się silnym czynnikiem motywującym, zwiększającym zaangażowanie uczniów oraz wzmacniającym postrzeganie chemii jako nauki mającej bezpośrednie zastosowanie w praktyce. Przedstawiony warsztat stanowi przykład efektywnego połączenia nauczania eksperymentalnego, edukacji opartej na dociekaniu naukowym oraz kontekstów zaczerpniętych z życia codziennego, wspierając rozwój wiedzy, umiejętności praktycznych i zainteresowania chemią.

Podziękowanie: Projekt „Odkrywaj z nami chemię” uzyskał dofinansowanie ze środków budżetu państwa w ramach programu Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego pod nazwą „Nauka dla Społeczeństwa II” nr projektu NdS-II/SP/0079/2024/01 kwota dofinansowania 999 900,00 zł stanowiąca całkowitą wartość projektu.



S08 PS02

Chemia jako przestrzeń odkrywania – uniwersytet otwarty dla uczniów

Izabela Dobrzyńska^{1,2}, Anna Sankiewicz^{1,2}

¹*Pracownia Bioanalizy, Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku;
ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok*

²*Liceum Ogólnokształcące im. A. Mickiewicza w Białymstoku;
ul. Brukowa 2, 15-889 Białystok
izadob@uwb.edu.pl*

Współczesna edukacja wymaga tworzenia przestrzeni sprzyjających współpracy pomiędzy szkołami a uczelniami wyższymi. Uniwersytet, jako ośrodek wiedzy, badań naukowych i innowacji, odgrywa istotną rolę w rozwijaniu zainteresowań młodzieży oraz kształtowaniu kompetencji niezbędnych w dynamicznie zmieniającym się świecie. Otwierając swoje laboratoria, pracownie i sale dydaktyczne dla uczniów, umożliwia im bezpośredni kontakt z nauką oraz poznanie specyfiki studiów i pracy badawczej.

W ramach działań popularyzujących naukę na Uniwersytecie w Białymstoku realizowane są liczne inicjatywy edukacyjne skierowane do uczniów szkół podstawowych i ponadpodstawowych. Należą do nich między innymi:

- warsztaty laboratoryjne i wykłady prowadzone w ramach programu „Studiuj z UwB”,
- zajęcia organizowane przez Akademię Młodego Badacza (AMB),
- pokazy naukowe podczas „Spotkań u chemików”,
- cykle edukacyjne dla maturzystów „Chemia na Sygnale”,
- spotkania z naukowcami w ramach programu tutorskiego UwB „Uczeń jako badacz, naukowiec i odkrywca”,
- wydarzenia popularyzujące naukę podczas festiwali i dni otwartych.

Szczególne miejsce zajmują zajęcia laboratoryjne, które umożliwiają uczniom samodzielne wykonywanie doświadczeń, poznawanie nowoczesnych metod badawczych oraz utrwalanie wiedzy zdobytej w szkole. Warsztaty te stanowią cenne uzupełnienie programu nauczania oraz wspierają przygotowanie uczniów do olimpiad, konkursów i egzaminu maturalnego. Dzięki samodzielnemu wykonywaniu doświadczeń oraz rozwijaniu umiejętności analizy i interpretacji wyników badań uczniowie pogłębiają wiedzę teoretyczną, doskonalą umiejętności praktyczne oraz uczą się wykorzystywać zdobytą wiedzę do rozwiązywania problemów naukowych.

Realizowane inicjatywy pozwalają uczniom zdobywać praktyczne doświadczenia, rozwijać pasję oraz świadomie planować dalszą ścieżkę edukacyjną. Kontakt z pracownikami naukowymi i studentami sprzyja budowaniu motywacji do dalszego kształcenia, a możliwość pracy w profesjonalnych laboratoriach zwiększa pewność siebie uczniów podczas wykonywania doświadczeń i rozwiązywania problemów badawczych.

Działania te wzmacniają współpracę pomiędzy uczelnią a szkołami, wspierając nauczycieli w realizacji nowoczesnej edukacji opartej na doświadczeniu i aktywnym uczestnictwie uczniów. Uniwersytet otwarty dla młodzieży staje się tym samym ważnym elementem budowania edukacji przyszłości, łącząc wiedzę akademicką z praktyką, wspierając przygotowanie do olimpiad czy egzaminu maturalnego oraz inspirując młode pokolenie do podejmowania studiów i wyzwań naukowych.



S08 PS03

Zajęcia kółka chemicznego „Otrzymywanie emulsji i badanie ich właściwości”

Agnieszka Gawłowska – Kamocka

*Centrum Kształcenia Zawodowego i Ustawicznego w Łodzi;
90-542 Łódź, ul. Żeromskiego 115;
gawla@interia.pl*

Na posterze przedstawiono zajęcia szkolnego kółka chemicznego. Zajęcia kółka chemicznego przeznaczone są dla uczniów dla klas siódmych, którzy dobrowolnie chcą pogłębiać wiedzę i rozwijać swoje zainteresowania w zakresie chemii. Zajęcia były przeprowadzone w szkole podstawowej z klasami integracyjnymi w Łodzi, w szkolnej pracowni chemicznej. Grupa liczyła 10 uczniów z klasy VIIC - klasy integracyjnej, klasa zżyta, dobrze zorganizowana, kilku uczniów szczególnie uzdolnionych, osiągających wysokie średnie ocen, jeden uczeń posiadający orzeczenie o potrzebie kształcenia specjalnego. Klasa aktywnie uczestniczy w życiu szkoły. Podczas zajęć uczniowie samodzielnie otrzymują emulsję olej - woda i woda – olej oraz badają ich właściwości. Prezentacja dotyczy metodologii badań własnych tj. celu i przedmiotu badań, technik, metod i narzędzi badawczych, problemu badawczego oraz terenu badań i grupy badań. Przedstawiono również analizę badań własnych, w których dokonano analizy wyników ankiety ewaluacyjnej kółka chemicznego. Ponadto w pracy przedstawiono własne wnioski.

Na podstawie swobodnej obserwacji można stwierdzić, że zajęcia laboratoryjne wzbudzają ogromne zainteresowanie wśród uczniów, są bardziej aktywni, niż na zajęciach teoretycznych, szybciej przyswajają wiedzę, łatwiej zapamiętują, jeśli mogą coś zobaczyć, chętnie uczestniczą w takich zajęciach, sami nawzajem siebie mobilizują. Uczniowie są dumni, jeśli mogą coś samodzielnie wykonać i tym się pochwalić.

Przeprowadzone zajęcia oraz obserwacje, ankieta pozwalają wyciągnąć następujące wskazówki : wykonywanie większej liczby doświadczeń, z których uczeń może wyciągnąć wnioski oraz dostosowanie programu zajęć kółka chemicznego do zainteresowań ucznia, a także położyć większy nacisk na opanowanie czynności praktycznych, jak również pogłębiać umiejętność wykorzystania wiedzy w praktyce.



S08 PS04

Studencki proces konstruowania arkusza maturalnego z chemii jako model kształcenia kompetencji diagnostycznych przyszłych nauczycieli

Małgorzata Krzeczowska¹, Patryk Własiuk²

¹ Zakład Dydaktyki Chemii, Wydział Chemii UJ, Kraków

² Nauczyciel chemii, Kraków

adres korespondencyjny;

malgorzata.krzeczowska@uj.edu.pl

Przygotowanie przyszłych nauczycieli do prowadzenia rzetelnego pomiaru dydaktycznego wymaga rozwijania kompetencji związanych z konstruowaniem, oceną i doskonaleniem narzędzi diagnostycznych. Celem pracy jest przedstawienie procesu opracowywania studenckich arkuszy maturalnych z chemii oraz określenie znaczenia recenzji eksperckiej w kształtowaniu kompetencji diagnostycznych przyszłych nauczycieli. Badania wskazują, że ich rozwijaniu sprzyja angażowanie przyszłych nauczycieli w autentyczne działania obejmujące konstruowanie testów, analizę zadań, refleksję nad uzyskanymi wynikami i modyfikowanie przygotowanych materiałów (Wang, Wang i Huang, 2008; Reeves i Honig, 2015).

Badaniem objęto studentów drugiego toku studiów 2 stopnia Wydziału Chemii, zdobywających uprawnienia pedagogiczne, uczestniczących w kursie „Elementy pomiaru dydaktycznego w praktyce szkolnej”. Na podstawie analizy aktualnych arkuszy maturalnych i raportów Centralnej Komisji Egzaminacyjnej studenci przygotowywali autorskie arkusze egzaminacyjne wraz ze schematami oceniania. Następnie opracowane materiały poddawano niezależnym recenzjom eksperckim, dotyczącym poprawności merytorycznej, zgodności z wymaganiami egzaminacyjnymi, jednoznaczności poleceń oraz potencjalnej wartości diagnostycznej zadań. Po uwzględnieniu uwag recenzentów arkusze były pilotażowo wdrażane w szkołach ponadpodstawowych, a uzyskane wyniki poddawano analizie statystycznej.

Wdrożenie wieloetapowego procesu projektowania, recenzowania i walidacji narzędzi pomiarowych sprzyja rozwijaniu kompetencji diagnostycznych przyszłych nauczycieli. Studenci – przyszli nauczyciele - nabywają umiejętność krytycznej oceny jakości zadań egzaminacyjnych, dostrzegania zależności między konstrukcją zadania a osiągnięciami uczniów oraz interpretowania danych empirycznych w kontekście trafności i funkcji diagnostycznej narzędzi oceniania. Wyniki sugerują, że włączenie autentycznych działań, w tym recenzji eksperckiej, związanych z konstruowaniem i ewaluacją arkuszy egzaminacyjnych może stanowić wartościowy element kształcenia nauczycieli chemii, przygotowujący ich do świadomego i refleksyjnego wykorzystywania narzędzi pomiaru dydaktycznego w praktyce szkolnej. W pracy przedstawiono przykłady obrazujące ten proces.

Literatura

- Wang, T.-H., Wang, K.-H., Huang, S.-C. (2008). Designing a Web-based assessment environment for improving pre-service teacher assessment literacy. *Computers & Education*, 51(1), 448–462. <https://doi.org/10.1016/j.compedu.2007.06.010>
- Reeves, T. D., Honig, S. L. (2015). A classroom data literacy intervention for pre-service teachers. *Teaching and Teacher Education*, 50, 90–101. <https://doi.org/10.1016/j.tate.2015.05.007>



S08 PS05

Benchmarking dydaktyczny jako metoda wzmacniania aktywności twórczej uczniów – studium przypadku interdyscyplinarnego projektu edukacyjnego

Maria Małecka, Daniel Andrzejewski

Zespół Szkół Zawodowych Nr 1

ul. Świętego Floriana 3, 60-536 Poznań

maria.dot.malecka@gmail.com

Edukacja XXI wieku, funkcjonująca w warunkach gospodarki opartej na wiedzy, wymaga rozwijania u uczniów kompetencji twórczych, umiejętności współpracy oraz zdolności rozwiązywania problemów. Jedną z metod sprzyjających realizacji tych celów jest metoda projektu edukacyjnego, szczególnie w formie projektu o słabej strukturze. Umożliwia ona uczniom samodzielne konstruowanie wiedzy oraz podejmowanie decyzji poznawczych, a jej założenia odwołują się do konstruktywizmu i konektywizmu – teorii uczenia się podkreślających znaczenie działania, współpracy i refleksji w procesie budowania wiedzy.

W procesie doskonalenia jakości kształcenia coraz częściej wykorzystywany jest benchmarking dydaktyczny, rozumiany jako porównywanie procesów dydaktycznych i efektów uczenia się w celu identyfikacji skutecznych strategii edukacyjnych oraz upowszechniania dobrych praktyk.

Celem pracy była analiza roli dydaktycznego benchmarkingu wewnętrznego we wzmacnianiu aktywności twórczej uczniów podczas realizacji interdyscyplinarnego projektu edukacyjnego „Kropla. Wszystko zaczyna się od wody”, obejmującego integrację chemii, fizyki, geografii i biologii w Technikum nr 6 w Zespole Szkół Zawodowych Nr 1 w Poznaniu.

Badanie oparto na obserwacji pedagogicznej, analizie wytworów uczniowskich oraz porównaniu wyników testów diagnostycznych przeprowadzonych przed i po realizacji projektu. Proces dydaktyczny obejmował etapy pracy projektowej: zaangażowania, poszukiwania informacji, transformacji wiedzy, prezentacji oraz refleksji. W projekcie zastosowano elementy benchmarkingu uczniowskiego polegające na porównywaniu strategii rozwiązywania problemów badawczych, wyników eksperymentów oraz efektów pracy zespołów uczniowskich.

Analiza wyników (pre- i post-testu) wykazała przyrost wiedzy uczniów o 44% w zakresie właściwości fizykochemicznych wody oraz jej roli w środowisku. Wyniki potwierdzają, że zastosowanie benchmarkingu w metodzie projektu efektywnie stymuluje twórczą aktywność, samodzielność poznawczą oraz sprzyja integracji wiedzy międzyprzedmiotowej.



S08 PS06

Benchmarking dydaktyczny w doskonaleniu zawodowym nauczycieli – analiza lekcji otwartych

Maria Małecka, Daniel Andrzejewski

Zespół Szkół Zawodowych Nr 1

ul. Świętego Floriana 3, 60-536 Poznań

maria.dot.malecka@gmail.com

Współczesny system edukacyjny wymaga od nauczycieli systematycznego rozwijania kompetencji merytorycznych, pedagogicznych i psychologicznych. Doskonalenie warsztatu pracy nauczyciela opiera się na refleksji nad własną praktyką dydaktyczną oraz wymianie doświadczeń w środowisku zawodowym. Jedną z metod wspierających ten proces jest benchmarking, rozumiany jako identyfikowanie i twórcze adaptowanie najlepszych praktyk edukacyjnych.

Celem pracy było wdrożenie benchmarkingu wewnętrznego w ramach lekcji otwartych prowadzonych w Technikum nr 6 w Poznaniu, zgodnie z priorytetami Ministerstwa Edukacji Narodowej na rok szkolny 2025/2026. Badania przeprowadzono podczas interdyscyplinarnych zajęć z zakresu chemii, geografii, fizyki i biologii, realizowanych w ramach projektu edukacyjnego „Kropla. Wszystko zaczyna się od wody”. Lekcje otwarte stanowiły narzędzie wymiany doświadczeń oraz ewaluacji praktyki dydaktycznej, natomiast rezultaty projektu uczniowskiego stały się punktem wyjścia do benchmarkingu nauczycielskiego, ukierunkowanego na identyfikację i adaptację najlepszych praktyk w procesie kształcenia.

Analiza arkuszy obserwacji zajęć, ankiet oraz dyskusji nauczycieli wskazuje, że lekcje otwarte sprzyjają ujawnianiu wiedzy ukrytej (tacit knowledge), wspierają autorefleksję oraz umożliwiają wspólne definiowanie standardów jakości pracy dydaktycznej. Zastosowanie benchmarkingu przyczyniło się do doskonalenia metod nauczania, zwiększenia integracji treści dydaktycznych i wychowawczych oraz wzmacniania kultury współpracy w środowisku nauczycielskim.

Wyniki badania potwierdzają, że benchmarking wewnętrzny realizowany poprzez lekcje otwarte może stanowić skuteczne narzędzie innowacji pedagogicznej wspierające rozwój zawodowy nauczycieli i podnoszące jakość procesu kształcenia.



S08 PS07

Biochemiczna i farmakologiczna charakterystyka magnezu. Wykorzystanie dydaktyczne

Marian Mielniczak,

*Warszawska Uczelnia Medyczna im. Tadeusza Koźłuka
miel-mar@wp.pl*

Magnez jest pierwiastkiem chemicznym należącym do berylowców, sklasyfikowanym w 2 grupie i 3 okresie układu okresowego z liczbą atomową wynoszącą 12. Jest ważnym pierwiastkiem litosfery, hydrosfery oraz biosfery o znaczących własnościach chemicznych, biologicznych i farmakologicznych.

W 1755 roku szkocki chemik Joseph Black badając magnezję białą, czyli węglan magnezu, potwierdził obecność magnezu jako pierwiastka. Węglan magnezu licznie występuje w okolicach Magnezji, greckiego regionu geograficznego. W 1808 roku Anglik Humphry Dave otrzymał amalgamat magnezu z rtęcią, z którego uzyskał magnez.

Magnez stanowi 2,3% skorupy ziemskiej występując w licznych minerałach: oliwin, serpentyn, talk, magnezyt, dolomit, kizeryt, kainit, karnalit. W wodzie morskiej zawartość magnezu wynosi ok 0,5%. Jest składnikiem wielu wód mineralnych.

Produkcja magnezu realizowana jest z zastosowaniem dwóch głównych procesów elektrometalurgicznych: metod elektrochemicznych oraz metod elektrotermicznych.

Magnez będący składnikiem związków chemicznych uczestniczy w kilkuset procesach biochemicznych warunkujących funkcjonowanie żywych organizmów.

Jest podstawowym pierwiastkiem niezbędnym do prawidłowego funkcjonowania enzymów komórkowych odpowiedzialnych za procesy błonowe, na przykład wiązanie hormon-receptor. Uczestniczy w fizjologicznych procesach kanałów wapniowych, trans-membranowej dyfuzji jonów oraz reguluje procesy cykazy adenylowej. Funkcjonuje jako antagonistą wapnia, wpływając na mechanizmy skurczu komórek mięśniowych.

Magnez, jako kation wewnątrzkomórkowy, jest pierwiastkiem katalizującym i tkankotwórczym o podstawowym znaczeniu fizjologicznym.

Uczestniczy w wielu przemianach: węglowodanowej, białkowej, tłuszczowej oraz w reakcjach oksydo-redukcyjnych.

Bezpośrednio z biochemiczną charakterystyką magnezu i jego związków związana jest charakterystyka farmakologiczna i kliniczna w zakresie:

- pierwotnego niedoboru magnezu i jego patologicznych następstw,
- wtórnego niedoboru magnezu z zaburzeniami podaży i wchłaniania, braku regulacji nerwowo-endokrynologicznej, jak również nadmiernym wydalaniem nerkowym,
- nadmiaru magnezu z uwzględnieniem podaży pozajelitowym.

Istotnymi zagadnieniami w analizie farmakologicznego wykorzystania magnezu, jego niedoboru w organizmie oraz nadmiaru, są planowane założenia terapeutyczne.

Wymieniona tematyka w szerszym zakresie przedstawiona zostanie w komunikacie.

Również zaprezentowane zostaną możliwości dydaktycznego wykorzystania analizowanych problemów.



S08 PS08

Od laboratorium do edukacji: samopływające fotokatalizatory jako kontekst organizowania aktywności poznawczej

Aleksandra Zahorska

*Zakład Dydaktyki i Popularyzacji Nauki, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański;
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk;
aleksandra.zahorska@ug.edu.pl*

W dyskursie dydaktycznym pojęcie paradygmatu bywa utożsamiane z metodą nauczania, chociaż dotyczy ono podstawowych założeń dotyczących wiedzy, uczenia się, roli nauczyciela i uczących się oraz sensu przypisywanego edukacji. Celem posteru jest teoretyczne porównanie trzech paradygmatycznie odmiennych modeli edukacji: obiektywistycznego, konstruktywistyczno-interpretatywnego i transformatywnego, z wykorzystaniem wspólnego problemu chemicznego. W każdym z tych modeli inaczej organizowana jest aktywność poznawcza. Kontekst stanowią badania nad zastosowaniem samopływających fotokatalizatorów na nośnikach węglowych do usuwania pozostałości farmaceutyków z wody. Porównanie obejmuje sposób ujmowania problemu, status i sposób budowania wiedzy, rolę nauczyciela i uczących się, funkcję eksperymentu, uruchamiane sposoby rozumowania oraz rozwijane kompetencje. Analiza ma pokazać, że o osadzeniu paradygmatycznym zajęć nie świadczy sama obecność doświadczenia, pracy zespołowej czy pytań problemowych. Decydują o nim założenia określające, czym jest wiedza, w jaki sposób powstaje, kto rozstrzyga o jej poprawności i czemu służy podejmowana aktywność. Ten temat chemiczny posłuży zatem do pokazania, jak odmienne rozumienie wiedzy prowadzi do odmiennych sposobów organizowania nauczania i aktywności uczących się.

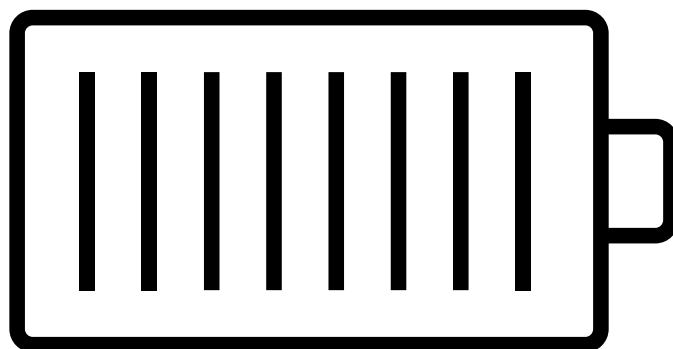


Projekt współfinansowany przez Narodową Agencję Wymiany Akademickiej (nr BPN/BCH/2025/00023/00001 – kierownik projektu prof. dr hab. Ewa Siedlecka) oraz Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach funduszu DS 531-T130-D507-26.



S09

Elektrochemia i elektroanaliza





Wykłady sekcyjne



S09 WS01

Struktura, reaktywność i trwałość metalowo-organicznych szkieletów na bazie miedzi jako elektrokatalizatorów do redukcji tlenu i azotanów

Paweł J. Kulesza^a, Anna Chmielnicka^a, Iwona A. Rutkowska^a, Shaghayegh Naghdi^b, Dominik Eder^b

^aUniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Pasteura 1, 02-093 Warszawa, Polska

^bTechnische Universität Wien, Institut für Materialchemie, Getreidemarkt 9, 1060, Vienna, Austria
e-mail: pkulesza@chem.uw.edu.pl

Ze względu na takie cechy, jak duża powierzchnia właściwa, regulowane rozmiary i topologie porów, wyraźnie zdefiniowane węzły metalowe, możliwość dostosowania składu chemicznego oraz funkcjonalność powierzchni, struktury metalowo-organiczne (MOF) są badane pod kątem zastosowań elektrochemicznych, a w szczególności w zakresie elektrokatalizy w reakcjach konwersji energii, w tym w reakcjach wydzielania wodoru, utleniania wodoru, wydzielania tlenu oraz redukcji tlenu. Zbadano kilka klas katalizatorów opartych na MOF pod kątem elektroredukcji azotanów.

W naszych badaniach analizujemy nowe MOF-y złożone z powtarzających się wzorów przestrzennych lub płaskich, w których jony miedzi są skoordynowane z ligandami organicznymi za pomocą wiązań kowalencyjnych. Motyw strukturalny opisujący otoczenie koordynacyjne centrów miedziowych jest porównywalny z szkieletem HKUST-1 (znanego również jako MOF-199 lub Cu-BTC), zbudowanego z dimerycznych jednostek metalowych (Cu) połączonych cząsteczkami łącznika w postaci 1,3,5-trikarboksylan benzenu. Fakt, że Cu(II) jest wykorzystywany jako centrum metalowe w porowatych metalowo-organicznych strukturach ramowych na bazie miedzi, sugeruje różnorodne zastosowania elektrokatalityczne. Można racjonalnie oczekiwać, że zarówno metaliczne centra jonów miedzi, jak i warstwowa struktura ulepszonych MOF ułatwiają przeniesienie elektronów i zwiększają natężenia prądu katalitycznego. Z historycznego punktu widzenia wiadomo, że związki koordynacyjne miedzi wchodzi w interakcje z małymi cząsteczkami nieorganicznymi, jednak kwestie takie jak struktura, reaktywność i trwałość podczas długotrwałych procesów elektrokatalitycznych (np. redukcja tlenu i azotanów lub wydzielanie wodoru) są mniej zbadane. Te ostatnie kwestie mają zasadnicze znaczenie dla technologii elektrochemicznej konwersji energii oraz elektrosyntezy, dlatego też zostaną omówione w niniejszej prezentacji.

Rozważono różne materiały katalityczne typu MOF. Jedną z istotnych cech materiałów zsyntetyzowanych na Politechnice Wiedeńskiej jest obecność donorów azotu, które ułatwiają przejścia redoks Cu^{II} do Cu^{I} oraz katalizują redukcję tlenu. Jednak różnice w właściwościach sterycznych i elektronowych mogą prowadzić do odmiennego wiązania cząsteczki O_2 i tym samym wpływać na redukcję O_2 . Ponadto sąsiednie łańcuchy w układach są połączone wiązaniami wodorowymi między ligandem aqua a atomami tlenu w monokoordynujących karboksylanach. Przypuszcza się, że grupy tworzące wiązania wodorowe zapewniają efektywne przeniesienie protonów do i z centrów metalowych, niezbędne do wydajnego sprzężonego z protonami przenoszenia elektronów.

Wydajność MOF-ów na bazie miedzi wymaga wytworzenia centrów miedziowych o różnych stopniach utlenienia. Na przykład powstanie wysoce aktywnych centrów Cu(0) prowadzi do zerwania wiązań i lokalnego rozkładu struktury MOF-u; jednak w określonych warunkach skutki degradacji można kontrolować lub zminimalizować. Przedstawione zostaną wyniki badań trwałości i zostaną one skorelowane z aktywnością katalityczną podczas elektroredukcji takich układów modelowych, jak tlen i azotany.



S09 WS02

Kompozyty azotków metali przejściowych z fazą węglową jako bifunkcyjne elektrokatalizatory reakcji wydzielania wodoru i tlenu

Anna Ilnicka^a, Patrycja Grabowska^a, Mariusz Szkoda^{b,c}, Laura Kubińska^a,

Marta Gajewska^d

^a Wydział Chemii, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, ul. Gagarina 7, 87-100 Toruń, Polska;

^b Wydział Chemiczny, Katedra Chemii i Technologii Materiałów Funkcjonalnych, Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12, 80-233, Gdańsk, Polska;

^c Centrum Materiałów Przyszłości, Narutowicza 11/12, 80-233, Gdańsk, Polska;

^d Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii, Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, ul. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Polska
e-mail: ailnicka@umk.pl

Elektroliza wody zasilana energią ze źródeł odnawialnych jest jedną z kluczowych technologii pozyskiwania tzw. zielonego wodoru, nośnika energii istotnego dla dekarbonizacji przemysłu, energetyki i transportu. Wydajność procesu zależy w decydującym stopniu od aktywności elektrokatalizatorów reakcji wydzielania wodoru (HER) i reakcji wydzielania tlenu (OER), a opracowanie wolnych od metali szlachetnych materiałów bifunkcyjnych pozostaje jednym z głównych wyzwań współczesnej elektrochemii materiałowej.

W ramach przeprowadzonych badań otrzymano trzy serie kompozytów azotków metali przejściowych modyfikowanych fazą węglową o kontrolowanej zawartości, różniących się rodzajem azotku oraz udziałem składnika węglowego. Dla kompozytów opartych na azotku kobaltu wykazano, że wprowadzenie węgla istotnie zwiększa aktywność katalityczną w reakcji HER; nadpotencjały uzyskane dla próbek o umiarkowanej i podwyższonej zawartości fazy węglowej zbliżały się do wartości charakterystycznych dla komercyjnego katalizatora referencyjnego Pt/C. Najwyższą elektrochemicznie aktywną powierzchnię (ECSA) oraz najlepszą stabilność długoterminową odnotowano dla próbki o umiarkowanym udziale węgla, co wskazuje na optymalny stosunek fazy aktywnej do przewodzącego nośnika węglowego. Zbliżoną zależność zaobserwowano dla kompozytów azotku niklu modyfikowanych węglem domieszkowanym azotem, dla których optymalny skład zapewnił najkorzystniejszą wydajność bifunkcyjną w środowisku alkalicznym. Efekt ten przypisano synergicznemu oddziaływaniu nanocząstek fazy azotkowej z przewodzącą matrycą węglową, sprzyjającemu zarówno transportowi elektronów, jak i dostępności centrów aktywnych. Odm inną prawidłowość stwierdzono natomiast dla kompozytów azotku molibdenu współwystępującego z tlenkiem molibdenu, gdzie optymalna zawartość fazy węglowej okazała się zależna od środowiska reakcji: niższy udział węgla sprzyjał aktywności katalitycznej w środowisku kwasowym, podczas gdy wyższy udział był korzystniejszy w środowisku zasadowym.

Uzyskane wyniki, wskazują, że modyfikacja węglowa stanowi skuteczne narzędzie projektowania elektrokatalizatorów na bazie azotków metali przejściowych. Jej korzystny wpływ na aktywność katalityczną zależy od typu reakcji elektrodowej (HER vs. OER), struktury krystalicznej azotku oraz pH elektrolitu, natomiast nadmierna zawartość fazy węglowej może prowadzić do częściowego blokowania aktywnych centrów metalicznych. Przedstawione wyniki dostarczają praktycznych wskazówek dotyczących optymalizacji stosunku azotek:węgiel, istotnych z punktu widzenia projektowania wydajnych i stabilnych bifunkcyjnych elektrokatalizatorów przeznaczonych do zastosowań w technologiach elektrolizy wody.

Podziękowanie: Praca ta została wykonana w wyniku realizacji projektu badawczego nr UMO-2024/53/B/ST5/02770, finansowanego ze środków Narodowego Centrum Nauki.



S09 WS03

Nanostrukturalne materiały Au-Ti do wysokoczułej detekcji glukozy w płynach ustrojowych

Katarzyna Grochowska

*Pracownia Materiałów Funkcjonalnych
Ośrodek Techniki Plazmowej i Laserowej
Instytut Maszyn Przepływowych Polskiej Akademii Nauk;
ul. Fiszer 14, 80-231 Gdańsk;
kgrochowska@imp.gda.pl*

Cukrzyca należy do najpowszechniejszych chorób cywilizacyjnych, a przewidywany wzrost liczby pacjentów o ponad 60 % w ciągu najbliższych dekad utrzymuje bardzo silne zapotrzebowanie na wiarygodne, a jednocześnie możliwie nieinwazyjne metody monitorowania stężenia glukozy. W tym kontekście prowadzone są szeroko zakrojone badania nad biokompatybilnymi materiałami elektrodowymi przeznaczonymi do oznaczania glukozy w płynach ustrojowych innych niż krew (np. pot, ślina).

W niniejszych badaniach opracowano dwa typy materiałów elektrodowych. W wyniku anodyzacji folii tytanowej wytworzono nanorurki ditlenku tytanu, które następnie pokryto cienkimi warstwami złota przy użyciu techniki rozpylania magnetronowego. Drugi typ elektrod powstał w wyniku chemicznego wytrawienia warstwy nanorurek, co pozwoliło otrzymać podłoża o powierzchni wiernie odwzorowującej spód usuniętych rurek, tj. zamiast nanorurek, na powierzchni obecne są nanodołki. Tego typu podłoża umożliwia ulokowanie nanocząstek Au w konfiguracji jedna nanocząstka na jeden nanodołek, co jest kluczowe dla odtwarzalnego wytwarzania materiałów o uporządkowanej morfologii. Cienkie warstwy złota nanoszono na podłoża za pomocą rozpylania magnetronowego, a potem zastosowana obróbka termiczna w trybie ciągłym i impulsowym doprowadziła do uformowania się nanocząstek.

Elektroda na bazie nanorurek ditlenku tytanu pokrytych cienkimi warstwami złota charakteryzowała się czułością $45 \mu\text{A}/\text{cm}^2\text{mM}$ w zakresie stężeń glukozy: 0,05-3 mM i limitem detekcji na poziomie $50 \mu\text{M}$ w przypadku, gdy badania prowadzone były w PBS. W roztworze zasadowym zawierającym surowicę ludzką czułość materiału wynosiła $124 \mu\text{A}/\text{cm}^2\text{mM}$ w zakresie od 0,05 do 6 mM glukozy i osiągnięto limit detekcji na poziomie $50 \mu\text{M}$. Dodatkowo zweryfikowano wpływ zginania materiału elektrodowego na jego odpowiedź elektrochemiczną. Zgodność wyników na poziomie 95 % potwierdza, że proponowane elektrody są odporne na odkształcenia.

Materiał na bazie strukturyzowanej folii tytanowej pokrytej nanocząstkami złota wytworzonymi na drodze obróbki termicznej w trybie impulsowym o konfiguracji jedna nanocząstka Au na jeden nanodołek wykazywał czułość $49,1 \mu\text{A}/\text{cm}^2\text{mM}$ w zakresie 0,01-1,00 mM w przypadku skali liniowej oraz $69,3 \mu\text{A}/\text{cm}^2\text{mM}$ w zakresie 0,4-11 mM w przypadku skali logarytmicznej. Próg detekcji wynosił: $8,4 \mu\text{M}$. Po modyfikacji enzymem, elektroda charakteryzowała się czułością: $23,47$ oraz $10,63 \mu\text{A}/\text{cm}^2\text{mM}$ odpowiednio dla stężeń glukozy w zakresach 0,04 – 15,05 i 15,05 – 40,00 mM oraz limitem detekcji: $1,75 \mu\text{M}$. Materiał elektrodowy był stabilny w trakcie długotrwałych pomiarów i selektywny względem takich czynników interferujących jak: NaCl, kwas askorbinowy, fruktoza, glicyna, dopamina, kwas acetylosalicylowy, kwas moczowy i paracetamol.



S09 WS04

Warstwy zeolitowo-węglowe jako elementy sensoryczne czujników woltamperometrycznych

Katarzyna Fendrych

*Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie;
Al. Mickiewicz 30, 30-059 Kraków ;
fendrych@agh.edu.pl*

Postęp w rozwoju materiałów nanostrukturalnych stworzył nowe możliwości projektowania czujników elektrochemicznych o wysokiej skuteczności analitycznej. Wśród materiałów wykorzystywanych do modyfikacji powierzchni elektrod szczególne znaczenie mają zeolity – krystaliczne glinokrzemiany o dobrze rozwiniętym układzie porów, cechujące się wysoką pojemnością sorpcyjną oraz zdolnością do selektywnej wymiany jonów. Połączenie tych właściwości z elektrochemicznymi metodami analizy sprawia, że elektrody modyfikowane zeolitami (ang. *Zeolite-Modified Electrodes*, ZMEs) od wielu lat stanowią przedmiot licznych badań, koncentrujących się na możliwościach kształtowania ich właściwości elektrochemicznych oraz wykorzystaniu w analizie elektrochemicznej.

W niniejszej pracy przedstawiono nową grupę czujników typu ZMEs, w których zamiast powszechnie stosowanego grafitu [1–3] wykorzystano nowoczesne nanomateriały węglowe pełniące funkcję fazy przewodzącej. Wśród zastosowanych materiałów znalazły się sadza przewodząca [4,5], mezoporowaty węgiel [6,7], wielościennie nanorurki węglowe [8] oraz nanorogi węglowe [9]. Zaproponowana koncepcja stanowi nowatorskie podejście do konstruowania elektrod ZMEs, w których kompozytowe warstwy złożone z fazy zeolitowej i materiałów węglowych o zróżnicowanej budowie strukturalnej oraz właściwościach elektronowych pozwalają kształtować przebieg procesów zachodzących na granicy elektroda–roztwór, wpływając na szybkość wymiany elektronów, właściwości adsorpcyjne oraz transport analitów, prowadząc jednocześnie do uzyskania czujników o wysokiej czułości, selektywności i stabilności sygnału.

Możliwości praktycznego zastosowania zaprojektowanych czujników oceniono poprzez oznaczenia związków reprezentujących zróżnicowane grupy analitów. Obejmowały one substancje farmaceutyczne, takie jak paracetamol, mesalazyna, furazydyna i opipramol, związki o znaczeniu biologicznym i żywieniowym, reprezentowane przez witaminy z grupy B, a także anality istotne z punktu widzenia monitoringu środowiska i jakości produktów konsumenckich, takie jak jony niklu(II). Uzyskane wyniki potwierdziły, że zaprojektowane warstwy zeolitowo-węglowe stanowią efektywny materiał do konstruowania nowoczesnych czujników woltamperometrycznych o szerokich możliwościach analitycznych.

Literatura

- [1] R. Porada, K. Fendrych, and B. Baś, *Electroanalysis*, 32, 1208–1219 (2020).
- [2] R. Porada, K. Fendrych, and B. Baś, *Meas. J. Int. Meas. Confed.*, 179, 109450 (2021).
- [3] K. Fendrych, R. Porada, and B. Baś, *J. Hazard. Mater.*, 448, 130953 (2023).
- [4] R. Porada, K. Fendrych, and B. Baś, *Microchim. Acta*, 188, 323 (2021).
- [5] R. Porada, K. Fendrych, J. Kochana, and B. Baś, *Food Control*, 142, 109243 (2022).
- [6] K. Fendrych, R. Porada, and B. Baś, *Electrochim. Acta*, 468, 143209 (2023).
- [7] K. Fendrych, R. Porada, and B. Baś, *J. Electrochem. Soc.*, 172, 017523 (2025).
- [8] K. Fendrych, *J. Electrochem. Soc.*, 172, 107508 (2025).
- [9] K. Fendrych, J. Nyrka, J. Smajdor, R. Piech, and B. Baś, *Int. J. Mol. Sci.*, 26, 10469 (2025).

Badania zostały sfinansowane w ramach programu „Inicjatywa Doskonałości – Uczenia Badawcza” (IDUB) w Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie (ID projektu: 18144) oraz subwencji Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla Akademii Górniczo-Hutniczej im. Stanisława Staszica w Krakowie.



S09 WS05

Czy ten produkt ma potencjał? Elektrochemia na tropie jakości żywności.

Konrad Rudnicki

*Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki, Tamka 12, 91-403 Łódź
konrad.rudnicki@chemia.uni.lodz.pl*

Elektrochemia to obszerny dział analizy instrumentalnej, zajmujący się charakterystyką i opisem zjawisk fizycznych i chemicznych, które zachodzą na granicy faz pomiędzy elektrolitem a elektrodą, a także pomiędzy roztworami dwóch niemieszających się ze sobą elektrolitów. Elektrochemia cieczerwych granic fazowych dwóch niemieszających się roztworów elektrolitów (ITIES) jest coraz częściej stosowaną metodą analityczną, która w ostatnich latach zyskała dużą popularność wśród naukowców. Wykorzystywana jest m.in. jako narzędzie w: elektroanalizie związków o znaczeniu biologicznym, syntezie różnego rodzaju materiałów, badaniu kinetyki procesów elektrochemicznych oraz do wielu innych ważnych zastosowań.

Mając na uwadze istniejące problemy społeczne związane z chemią spożywczą oraz kontrolą jakości żywności, bardzo ważną wydaje się być praca nad nowymi rozwiązaniami analitycznymi, w szczególności elektrochemicznymi, które pozwolą na opracowanie narzędzi do szybkiej analizy badanych produktów [1-2]. W prezentowanej pracy przedstawiam innowacyjne połączenie technik elektrochemicznych oraz układów bazujących na elektrochemii cieczerwych granic fazowych (ITIES) do badania związków o znaczeniu biologicznym, które występują w artykułach spożywczych. W ramach swoich badań, opracowałem szereg procedur analitycznych umożliwiających badanie/oznaczanie związków biologicznie czynnych takich jak: antybiotyki (cefotaksym i danofloksacyna), alkaloidy (chinina i hordenina) oraz aminy biogenne (fenyloetyloamina, tryptamina, histamina, spermina, spermidyna, putrescyna, kadaweryna i tyramina). Zaproponowane przeze mnie rozwiązania z powodzeniem zastosowano w badaniach złożonych próbek rzeczywistych – produktów żywnościowych [3-9].

Literatura:

- [1] K. Rudnicki, *et al. Trends Anal. Chem.* (2020) 128, 115907.
- [2] A. Krempiński, K. Rudnicki, *et al. Sci. Rep.* (2025) 15, 6917.
- [3] K. Rudnicki, *et al. Food Chem.* (2025) 478, 143734.
- [4] K. Rudnicki, *et al. polski patent nr P.436383* (2020).
- [5] K. Rudnicki, *et al. Food Chem.* (2021) 364, 130417.
- [6] K. Rudnicki, *et al. Food Chem.* (2024) 442, 138407.
- [7] K. Rudnicki, *et al. Talanta* (2025) 285, 127256.
- [8] K. Rudnicki, *et al. Sci. Rep.* (2024) 14, 14489.
- [9] K. Rudnicki, *et al. Microchim. Acta* 188 (2021) 1-9.

Podziękowania:

Badania zrealizowane w ramach grantów OPUS (UMO-2022/45/B/ST4/0218) i PRELUDIUM (UMO-2018/29/N/ST4/01054) sfinansowanych przez Narodowe Centrum Nauki w Krakowie.



S09 WS06

Elektrochromizm – od projektowania cząsteczki do inteligentnych materiałów

Monika Wałęsa-Chorab

Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu,

Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614

mchorab@amu.edu.pl

Dynamiczny rozwój elektroniki organicznej oraz rosnące zapotrzebowanie na inteligentne materiały funkcjonalne stwarzają nowe wyzwania w zakresie projektowania związków o precyzyjnie kontrolowanych właściwościach elektrochemicznych i optycznych. Szczególną uwagę przyciągają materiały elektrochromowe, które dzięki odwracalnej zmianie barwy pod wpływem przyłożonego potencjału znajdują zastosowanie m.in. w inteligentnych oknach, wyświetlaczach, elementach optoelektronicznych oraz urządzeniach do magazynowania energii.^{1,2}

Kluczową rolę w projektowaniu nowoczesnych materiałów elektrochromowych odgrywa świadoma synteza elektroaktywnych związków organicznych i kompleksów koordynacyjnych, których odpowiednio zaprojektowana struktura umożliwia tworzenie funkcjonalnych cienkich warstw. Wykorzystanie zarówno procesów elektropolimeryzacji, jak i fotopolimeryzacji pozwala na otrzymywanie materiałów o kontrolowanej architekturze oraz dostosowanych właściwościach elektrochemicznych i optycznych.^{3,4} Połączenie klasycznych układów π -skoniugowanych z architekturami hybrydowymi i supramolekularnymi stwarza nowe możliwości projektowania materiałów o wysokiej trwałości, efektywnym transporcie ładunku i odwracalnej odpowiedzi elektrochromowej.^{5,6}

Podziękowania: *Badania prowadzono w ramach projektu SONATA BIS numer 2019/34/E/ST5/00103 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki.*

Literatura:

- 1 C. Gu, A.-B. Jia, Y.-M. Zhang and S. X.-A. Zhang, *Chem. Rev.*, 2022, **122**, 14679–14721.
- 2 T. Ahmed, A. Mazumder, S. Kuriakose, A. Dubey, A. Elbourne, J. Ren, V. Krishnamurthi, E. Kandare, I. H. Abidi, E. Della Gaspera, S. Balendhran and S. Walia, *Nanoscale*, 2025, **17**, 18049–18076.
- 3 K. Muras, P. Rybak, S. Napierała, M. Hoffmann, M. Kubicki and M. Wałęsa-Chorab, *Dyes and Pigments*, 2025, **240**, 112811.
- 4 M. Nowacki, M. Hoffmann and M. Wałęsa-Chorab, *Int. J. Mol. Sci.*, 2025, **26**, 4807.
- 5 A. Mermela, M. Wałęsa-Chorab, M. Ludwiczak and P. Żak, *Inorg. Chem. Front.*, 2024, **11**, 4815–4825.
- 6 S. Napierała, M. Kubicki and M. Wałęsa-Chorab, *Inorg. Chem.*, 2025, **64**, 21387–21397.



S09 WS07

Funkcjonalne żele polimerowe na powierzchniach elektrod: właściwości i zastosowania elektroanalityczne

Kamil Marcisz, Paulina Gwardys, Marcin Karbarz

*Uniwersytet Warszawski Wydział Chemii;
ul. Ludwika Pasteura 1, 02-093 Warszawa
kmarcisz@chem.uw.edu.pl*

Żele polimerowe są coraz częściej wykorzystywane jako materiały do modyfikacji powierzchni elektrod. Dzięki trójwymiarowej sieci polimerowej oraz dużej zawartości rozpuszczalnika żele polimerowe umożliwiają efektywny transport jonów i cząsteczek, a możliwość ich łatwej funkcjonalizacji pozwala na immobilizację związków elektroaktywnych i enzymów. Ich właściwości można łatwo zmieniać poprzez odpowiedni dobór składu chemicznego, stopnia usieciowania oraz rodzaju grup funkcyjnych. Szczególnie interesującą grupę stanowią środowiskowo czułe żele polimerowe, zdolne do odwracalnych zmian objętości pod wpływem temperatury, pH lub siły jonowej. Połączenie tych właściwości z możliwością wprowadzania związków elektroaktywnych sprawia, że żele polimerowe znajdują szerokie zastosowanie w konstrukcji nowoczesnych układów elektroanalitycznych.¹

Nasze badania koncentrują się na opracowywaniu funkcjonalnych warstw żelowych otrzymywanych metodą elektrochemicznie indukowanej polimeryzacji wolnorodnikowej oraz na modyfikacji powierzchni elektrod złotych warstwami mikrożelowymi poprzez chemisorpcję i metodę „drop-on”. Metody te umożliwiają kontrolowane tworzenie warstw żelowych bezpośrednio na powierzchni elektrody oraz dostosowanie ich właściwości do planowanego zastosowania. Istotnym kierunkiem naszych badań jest otrzymywanie elektroaktywnych warstw żelowych poprzez funkcjonalizację sieci polimerowych związkami zdolnymi do ulegania odwracalnym reakcjom redoks. Badamy również wpływ budowy warstw żelowych oraz sposobu ich immobilizacji na właściwości elektrochemiczne otrzymanych układów.²

Opracowane warstwy żelowe stanowią podstawę do konstruowania funkcjonalnych interfejsów elektrochemicznych. Wykorzystujemy je w konstrukcji czujników i biocujników elektrochemicznych, elektrochemicznie sterowanych aktuatorów, układów kontrolowanego uwalniania substancji czynnych oraz do funkcjonalizacji mikroelektrod. Uzyskane wyniki pokazują, że funkcjonalne żele polimerowe stanowią uniwersalną platformę do projektowania nowych materiałów i interfejsów dla elektroanalizy, a jednocześnie mogą znaleźć zastosowanie w biomedycynie i technologii implantów.³⁻⁴

Podziękowanie: Prezentowane wyniki zostały otrzymane w ramach projektu badawczego o nr. 2021/43/D/ST5/01082 finansowanego ze środków Narodowego Centrum Nauki.

1. K. Marcisz, E. Zabost, M. Karbarz, *Applied Materials Today*, 2022, 29, 101656.
2. K. Marcisz, M. Karbarz, Z. Stojek, *Electrochemical Science Advances*, 2022, 2, e2100162.
3. K. Marcisz, K. Kaniewska, J. Romański, Z. Stojek, M. Karbarz, *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 2024, 960, 118218.
4. P. Gwardys, K. Marcisz, D. Jaglenc, J. Romański, M. Karbarz, *ACS Applied Materials and Interfaces*, 2025, 17, 36469–36477.



S09 WS08

Właściwości elektrokatalityczne i charakterystyka fizykochemiczna nanodrutów WO_3 interkalowanych miedzią: redukcja dwutlenku węgla i azotanów w środowisku kwaśnym

Iwona A. Rutkowska^a, Anna Chmielnicka^a, Enrico Negro^b, Beata Rytelawska^a, Gioele Pagot^b, Vito Di Noto^b, Paweł J. Kulesza^a

^aUniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Pasteura 1, 02-093 Warszawa, Polska

^bDepartment of Industrial Engineering, Universit`a degli Studi di Padova in Department of Chemical Sciences, Via Marzolo 1, Padova, (PD) 35131, Italy
e-mail: ilinek@chem.uw.edu.pl

Nasze aktualne zainteresowania badawcze koncentrują się na opracowywaniu, charakteryzowaniu oraz ustalaniu zależności między strukturą a reaktywnością materiałów funkcjonalizowanych, mających zastosowanie w wydajnej elektrokatalizie i elektrochemicznej konwersji energii. Coraz większą uwagę poświęca się elektrochemicznej redukcji dwutlenku węgla, gazu cieplarnianego przyczyniającego się do globalnych zmian klimatu. Biorąc pod uwagę fakt, że cząsteczka CO_2 jest bardzo stabilna, procesy jej elektroredukcji charakteryzują się dużymi nadpotencjałami. Tworzenie amoniaku jest jednym z najważniejszych procesów syntezy chemicznej. W warunkach przemysłowych amoniak jest syntetyzowany głównie z azotu i wodoru w procesie Habera-Boscha, który wymaga zwiększenia ciśnienia i podgrzania, pomimo zastosowania katalizatorów. W związku z tym opracowanie metodologii syntezy niskotemperaturowej jest atrakcyjne zarówno z praktycznych, jak i fundamentalnych względów. Ostatecznym celem elektrochemii jest wytwarzanie NH_3 w warunkach niskotemperaturowych, na przykład z azotanów, które w innym przypadku są znane jako zanieczyszczenia.

Zastosowanie tlenków metali jako matryc aktywnych w elektrokatalizie ma szczególne znaczenie. Zachowanie w środowisku wodnym, które sprzyja ruchliwości protonów i wpływa na ogólną reaktywność, odzwierciedla nie tylko właściwości chemiczne tlenku, ale także jego teksturę i morfologię.

Hybrydowy układ katalityczny, składający się z nanocentrów miedziowych pochodzących z tlenku miedzi(I), unieruchomionych w sieci nanodrutów z tlenku wolframu, wykazał aktywność elektrokatalityczną w zakresie redukcji dwutlenku węgla oraz azotanów (NO_3^- i NO_2^-) w środowisku kwaśnym. Układ katalityczny na bazie WO_3 zawierający miedź (Cu-WO_3) scharakteryzowano przy użyciu technik elektrochemicznych, spektroskopowych (Ramana), mikroskopowych (SEM) oraz rentgenowskich (XPS). Przedstawiono dowody na wbudowanie lub interkalację aktywnych centrów miedziowych w strukturze heksagonalnych nanodrutów WO_3 . Zgodnie z diagnostycznymi pomiarami metodą chromatografii gazowej sprzężonej ze spektrometrią masową oraz pomiarami spektrofotometrycznymi można stwierdzić, że katalizator Cu-WO_3 indukuje konwersję dwutlenku węgla do metanolu. Zgodnie z pomiarami spektrofotometrycznymi można stwierdzić, że katalizator Cu-WO_3 również indukuje przemianę azotanów w jony amonowe, które zostały zidentyfikowane jako amoniak przy użyciu metody indofenolowej. Na podstawie diagnostycznych elektroanalitycznych pomiarów woltametrycznych z dodatkową elektrodą Pt oraz przeniesieniem do środowiska alkalicznego potwierdzono tworzenie się amoniaku (ale nie hydrazyny). Metodologia elektroanalityczna okazała się również przydatna w oznaczaniu metanolu jako produktu redukcji dwutlenku węgla. Omówione zostaną również parametry wydajności procesu elektroredukcji.

Ogólnie rzecz biorąc, wyniki te są zgodne z poglądem, że centra katalityczne z wbudowanym miedzią, równoległe do aktywności redukcyjnej częściowo zredukowanych, niestechiometrycznych tlenków wolframu, inicjują i indukują elektroredukcję takich elektrochemicznie obojętnych reagentów, jak dwutlenek węgla, azotany, bromiany czy tlen cząsteczkowy.



S09 WS09

Elektrochemiczna detekcja białka C-reaktywnego z wykorzystaniem biomateriałów wyselekcjonowanych techniką „phage display”

Katarzyna Szot-Karpińska
Instytut Chemii Fizycznej PAN
Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa
ksztot@ichf.edu.pl

Technologię „phage display” wykorzystano do identyfikacji nowych biomateriałów receptorowych (bakteriofagów, peptydów oraz nanociał) zdolnych do specyficznego rozpoznawania białka C-reaktywnego (CRP) – kluczowego markera ogólnoustrojowego stanu zapalnego. Oddziaływania pomiędzy CRP a wyselekcjonowanymi biomateriałami scharakteryzowano z wykorzystaniem metod eksperymentalnych (biologicznych i fizykochemicznych) oraz modelowania komputerowego. Otrzymane biomateriały z powodzeniem zastosowano jako warstwy receptorowe w konstrukcji podłoża do bezpośredniej elektrochemicznej detekcji CRP [1-5].

W pierwszym etapie badań wykorzystano hybrydowe biomateriały oparte na bakteriofagach (wirusach infekujących bakterie), które posłużyły do modyfikacji elektrody jako warstwa biorozpoznająca. Jako ujemnie naładowany element biologiczny zastosowano faga P2, charakteryzującego się najwyższym powinowactwem do CRP. Wykorzystując metodę osadzania warstwa po warstwie (LbL), fag ten został elektrostatycznie związany z dodatnio naładowanymi nanowłóknami węglowymi na powierzchni elektrody z węgla szklanego. W ten sposób uzyskano przewodzący, fagowy nanomateriał hybrydowy, który posłużył do detekcji elektrochemicznej CRP [1].

W drugim etapie badań opracowano podłoża elektrodowe, w których jako warstwę biorozpoznającą wykorzystano peptydy pochodzące z fagów. Peptyd P3, zidentyfikowany jako najskuteczniejszy ligand wiążący CRP, został unieruchomiony na powierzchni elektrod ITO modyfikowanych krzemianami. Tak przygotowany układ zintegrowano z sekwencyjnym urządzeniem mikroprzepływowym typu point-of-care [2]. W celu oceny przydatności analitycznej, platformę przetestowano na próbkach surowicy, osocza oraz pełnej krwi. Uzyskano zadowalające wyniki oraz znacznie niższy próg detekcji w porównaniu do analogicznego układu wykorzystującego komercyjne przeciwciała monoklonalne [3].

W trzecim etapie badań jako elementy biorozpoznające wykorzystano nanociała pozyskane metodą „phage display”. Nanociała charakteryzują się wysoką stabilnością fizykochemiczną. Wyselekcjonowane nanociało E12, charakteryzujące się silnym powinowactwem do CRP, zostało pomyślnie zastosowane jako warstwa receptorowa w przenośnym, mikroprzepływowym urządzeniu elektrochemicznym. Układ ten, sterowany za pomocą smartfona z wykorzystaniem technologii NFC, zaprojektowano z myślą o bezpośredniej elektrochemicznej detekcji CRP [5].

Otrzymane metodą „phage display” nowe biomateriały rozpoznają CRP w zakresie stężeń porównywalnym do klasycznych przeciwciał monoklonalnych. Charakteryzują się wysoką stabilnością, dzięki czemu w przyszłości mogą stanowić dla nich alternatywę. Zastosowanie tych elementów biorozpoznających otwiera drogę do tworzenia zaawansowanych narzędzi diagnostycznych, pozwalających na szybkie różnicowanie infekcji wirusowych i bakteryjnych.

Literatura

- [1] K. Szot-Karpińska, P. Kudła, A. Szarota, M. Narajczyk, F. Marken, J. Niedziółka-Jönsson. *Bioelectrochemistry* 136 (2020) 107629.
- [2] K. Szot-Karpińska, P. Kudła, U. Orzeł, M. Narajczyk, M. Jönsson-Niedziółka, B. Pałys, S. Filipek, A. Ebner, J. Niedziółka-Jönsson, *Analytical Chemistry*, 95 (2023) 14475.
- [3] S. Boonkaew, K. Szot-Karpińska, J. Niedziółka-Jönsson, B. Pałys, M. Jönsson-Niedziółka, *Sensors and Actuators B: Chemical* 397 (2023) 134659.
- [4] S. Oloketuyi, R. Bernedo, A. Christmann, J. Borkowska, G. Cazzaniga, H. W. Schuchmann, J. Niedziółka-Jönsson, K. Szot-Karpińska, H. Kolmar, A. de Marco, *Biosensors* 11 (2021) 496.
- [5] S. Boonkaew, K. Szot-Karpińska, J. Niedziółka-Jönsson, A. de Marco, M. Jönsson-Niedziółka, *ACS Sensors* 9 (2024) 3066.



S09 WS10

Podglądając wędrówki cząsteczek – badanie mechanizmów dyfuzji i retencji w eutektożelach metodami elektrochemicznymi wspomagane statystyką wielowymiarową

Tomasz Swebocki, Grzegorz Kowalski, Angelika Łeppek, Clémence Le Coeur, Karolina Kwaczyński, Łukasz Półtorak, Jacek Ryk

Politechnika Gdańska, Wydział Fizyki i Matematyki Stosowanej,
Instytut Nanotechnologii i Inżynierii Materiałowej, Zakład Elektrochemii i Fizykochemii Powierzchni
G. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk, Polska
tomasz.swebocki@pg.edu.pl

Eutektozele, czyli żele otrzymywane z udziałem rozpuszczalników głęboko eutektycznych (ang. *deep eutectic solvents*, DES), stanowią obiecującą grupę miękkich materiałów funkcjonalnych, w których właściwości transportowe mogą być regulowane poprzez dobór składu fazy ciekłej. Z punktu widzenia zastosowań w kontrolowanym uwalnianiu substancji aktywnych kluczowe jest jednak nie tylko określenie, czy dana cząsteczka przenika przez materiał, lecz także jak szybko zachodzi ten proces, jak długo jest opóźniany oraz w jakim stopniu cząsteczki są zatrzymywane w strukturze żelu.

Podczas wykładu omówione zostanie elektrochemiczne podejście do czasowo-rozdzielczego badania permeacji cząsteczek przez żelatynowe eutektozele zawierające dwa modelowe rozpuszczalniki eutektyczne: glicelinę i relinę¹. Zastosowanie celi dyfuzyjnej oraz woltamperometrii cyklicznej umożliwiło monitorowanie przenikania sond molekularnych przez warstwę żelu w czasie rzeczywistym. Na podstawie zmian sygnału elektrochemicznego wyznaczono pozorne współczynniki transportu, stałe szybkości pobierania, czasy opóźnienia oraz efektywność dyfuzji. Dane z badań elektrochemicznych, wspomagane mikroskopią konfokalną oraz rozpraszaniu niskokątowemu promieni X (SAXS) pokazały, że skład eutektożelu istotnie wpływa na mechanizm transportu. Glicelina sprzyjała zachowaniu typu „gąbki”, prowadząc do silniejszej retencji cząsteczek i obniżenia efektywności dyfuzji. Relina działała natomiast bardziej jak bariera kinetyczna: wyraźnie opóźniała transport, ale w mniejszym stopniu ograniczała ilość cząsteczek docierających do elektrody. Analiza z wykorzystaniem statystyki wielowymiarowej pozwoliła powiązać parametry transportowe ze zmianami strukturalnymi materiału i rozróżnić odmienne ścieżki reorganizacji eutektożeli w zależności od rodzaju rozpuszczalnika eutektycznego.

Zaprezentowane podejście pokazuje, że elektrochemia może być skutecznym narzędziem do „podglądania” dyfuzji w miękkich materiałach żelowych, a połączenie pomiarów czasowo-rozdzielczych z analizą wielowymiarową umożliwia ilościowy opis retencji, opóźnienia i efektywności transportu w eutektożelach.

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu MINIATURA 9 (2025/09/X/ST11/00066) oraz współfinansowane przez Politechnikę Gdańską ze środków programu IDUB w ramach programu NOBELIUM (5/1/2024/IDUB/I.1a/No).

[1] Swebocki, T.; Kowalski, G.; Łeppek, A.; Coeur, C. L.; Kwaczyński, K.; Półtorak, Ł.; Ryl, J. ReDESIGNING Hydrogels for Biomedicine: Tuning Transport Control and Biological Functionality in Biocompatible, Antibacterial Eutectogels. *Adv. Funct. Mater.* **2026**, 36 (41), e74765. <https://doi.org/10.1002/adfm.74765>.



S09 WS11

Najnowsze osiągnięcia w konstrukcji elektrod jonoselektywnych - nowe podejście do poprawy stabilności wskazań

Cecylia Wardak

¹Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej, Wydział Chemii, Instytut Nauk Chemicznych, Katedra Chemii Analitycznej, Pl. Marii Curie Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin;
cecylia.wardak@mail.umcs.pl

Elektrody jonoselektywne to najstarsze czujniki elektrochemiczne. Są to tanie i proste czujniki potencjometryczne, co powoduje że od lat są z powodzeniem stosowane w wielu obszarach chemii analitycznej. Od końca poprzedniego wieku obserwuje się ich gwałtowny wzrost badań związanych z tymi elektrodami. Jest to związane z wprowadzeniem nowej odmiany konstrukcyjnej- elektrod nie zawierających roztworu elektrolitu wewnętrznego. Elektrody takie zwane elektrodami ze stałym kontaktem (ang. Solid Contact Ion-Selective Electrodes- SCISEs), w porównaniu do elektrod klasycznych są prostsze w obsłudze i transporcie, tańsze w produkcji, a co ważniejsze łatwe do miniaturyzacji. Wyzwaniem w projektowaniu elektrod typu solid kontakt jest usunięcie ich głównego mankamentu jakim jest niestabilność i nieodtwarzalność wskazań będąca konsekwencją bezpośredniego połączenia materiałów o różnym typie przewodnictwa-membrany jonoselektywnej o przewodnictwie jonowym i elektrody podłożowej o przewodnictwie elektronowym. Na przestrzeni ostatnich kilkudziesięciu opisano wiele rozwiązań, w których poprawę stabilności potencjału uzyskano dzięki zastosowaniu dodatkowego materiału w postaci warstwy pośredniej pomiędzy jonoczułą membraną a materiałem elektrody wewnętrznej lub jako dodatku do membrany.

W niniejszej pracy przedstawiono nowatorski projekt konstrukcji SCISEs polegający na zastosowaniu innowacyjnego podłoża elektrodowego - zespołu mikroelektrod złotych złożonego z kilkuset pojedynczych mikroelektrod. Rozwiązanie takie zastosowano w połączeniu ze sprawdzonymi układami membranowymi, w elektrodzie czułej na jony potasowe, amonowe, ołowiowe, chlorkowe i amonowe. Zastosowano dwa rodzaje podłoży elektrodowych różniących się kształtem, rozmieszczeniem i liczbą mikroelektrod. W każdym przypadkach membrana została naniesiona bezpośrednio na powierzchnię elektrody podłożowej. Badania wykazały, że pomimo braku dodatkowego materiału stałego kontaktu, zarówno w postaci warstwy pośredniej, jak i dodatku bezpośrednio do membrany - ISEs oparte na złotych mikroelektrodach zespolonych charakteryzowały się bardzo dobrymi parametrami analitycznymi. W przypadku każdego z czujników zaobserwowano znaczną poprawę stabilności, odwracalności i powtarzalności potencjału elektrodowego w porównaniu do elektrod wykorzystujących jako podłoże elektrodę dyskową z węgla szklanego lub złotą elektrodę dyskową. Dzięki zastosowaniu takiego innowacyjnego podłoża elektrody, przygotowanie czujnika zostało skrócone i uproszczone przy zachowaniu dobrej wydajności i stabilności wskazań.



S09 WS12

Analiza SECM procesów elektrodowych zachodzących przy silnie ujemnych potencjałach w wodnych elektrolitach

Angelika Holzinger, Vaishali Shrivastav, Ariba Aziz, Ahmed Elamine Ouali, Wojciech Nogala

*Instytut Chemii Fizycznej PAN
Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa
wnogala@ichf.edu.pl*

Procesy elektrodowe zachodzące przy silnie ujemnych potencjałach w wodnych roztworach elektrolitów mają istotne znaczenie w wielu zastosowaniach, takich jak produkcja wodoru, elektroosadzanie oraz elektrochemiczna redukcja dwutlenku węgla. W wielu przypadkach procesom tym towarzyszy wydzielanie wodoru, lokalne zmiany pH oraz sprzężone reakcje homogeniczne, co utrudnia badania mechanizmów reakcji oraz ilościową analizę kinetyki tych procesów.¹⁻³ Przestrzennie rozdzielcza charakterystyka aktywności elektrokatalitycznej w takich warunkach jest niezbędna do zrozumienia przebiegu reakcji, identyfikacji miejsc aktywnych oraz produktów pośrednich.

Skaningowa mikroskopia elektrochemiczna (SECM) jest techniką mniej popularną niż inne metody elektroanalityczne stosowane w badaniach procesów zachodzących na granicy faz ciało stałe-ciecz. We wcześniejszych pracach SECM wykorzystywano do badania wydzielania wodoru tryb sprzężenia zwrotnego z mediatorem (*mediated feedback*), detekcji wodoru oraz lokalnego obrazowania aktywności katalitycznej.⁴⁻⁷ Zastosowanie SECM do badania procesów zachodzących przy silnie ujemnych potencjałach podłoża pozostaje jednak wyzwaniem ze względu na zakłócenia wynikające z wydzielania gazu, zmian lokalnego składu elektrolitu oraz konkurencyjnych reakcji homogenicznych.

W niniejszej prezentacji omówione zostanie zastosowanie SECM w trybie sprzężenia zwrotnego do badania reakcji elektrodowych zachodzących przy silnie ujemnych potencjałach w wodnych roztworach elektrolitów. Szczególna uwaga zostanie poświęcona wpływowi wydzielania wodoru oraz lokalnych gradientów pH na mierzoną odpowiedź sprzężenia zwrotnego, a także roli reakcji homogenicznych sprzężonych z procesami zachodzącymi na mikroelektrodzie i badanym podłożu. Przedstawione zostaną wyniki uzyskane dla metalicznych podłoży polaryzowanych z wykorzystaniem bipotencjostatu, wraz z analizą kinetyczną opartą na krzywych zbliżeniowych SECM (approach curves) oraz eksperymentami obrazowania. Opracowana metodologia umożliwia lokalną charakterystykę aktywności elektrokatalitycznej oraz dostarcza informacji na temat mechanizmów reakcji zachodzących w warunkach istotnych dla procesów zachodzących w elektrochemicznych magazynach energii i elektrolizerach.

Literatura

- [1] Katsounaros, I.; Cherevko, S.; Zeradjanin, A.; Mayrhofer, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, *53*, 102.
- [2] Zhu, S.; Qin, X.; Xiao, F.; Yang, S.; Xu, Y.; Tan, Z.; Li, J.; Yan, J.; Chen, Q.; Chen, M.; Shao, M. *Nat. Catal.* **2021**, *4*, 711.
- [3] Michalak, M.; Roguska, A.; Nogala, W.; Opallo, M. *Nanoscale Adv.* **2019**, *1*, 2645.
- [4] Zhou, J.; Zu, Y.; Bard, A. *J. Electroanal. Chem.* **2000**, *491*, 22.
- [5] Selzer, Y.; Turyan, I.; Mandler, D. *Phys. Chem. B* **1999**, *103*, 1509.
- [6] Li, F.; Ciani, I.; Bertonecello, P.; Unwin, P.; Zhao, J.; Bradbury, C.; Fermin, D. *J. Phys. Chem. C* **2008**, *112*, 9686.
- [7] Liang, Z.; Ahn, H. S.; Bard, A. *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 4854.



S09 WS13

Oddziaływanie leków przeciwnowotworowych z modelowymi błonami fosfolipidowymi - badania powierzchniowe i elektrochemiczne.

Dorota Matyszewska¹, Damian Dziubak¹, Renata Bilewicz²

¹Wydział Chemii, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych, Uniwersytet Warszawski, ul. Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warszawa

²Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski, ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa
dorota.matyszewska@chem.uw.edu.pl

Monowarstwy fosfolipidowe otrzymywane metodą Langmuira na granicy faz woda-powietrze oraz dwuwarstwy lipidowe osadzone na podłożu stałym stanowią użyteczne modele błon komórkowych w badaniach oddziaływań leków przeciwnowotworowych. Wykazaliśmy, że wpływ antracyklin na modelowe błony komórek nowotworowych zależy zarówno od lipofilowości leku, jak i od składu oraz ładunku błony [1–3].

W kolejnych badaniach określono wpływ doksorubicyny (DOx) na monowarstwy i dwuwarstwy DMPC, traktowane jako uproszczony model błon zdrowych komórek [4]. DOx powodowała zmiany strukturalne i funkcjonalne warstw lipidowych, obejmujące zwiększenie grubości dwuwarstwy, segregację fazową oraz modyfikację jej właściwości elektrochemicznych i barierowych. Wyniki wskazują, że doksorubicyna może wbudowywać się w dwuwarstwę zwitterjonowego DMPC, wywołując efekty odmienne od dominujących oddziaływań elektrostatycznych obserwowanych w modelach błon nowotworowych.

Badano również synergistyczne działanie epirubicyny (EPI) i paklitakselu (PTX) na trójskładnikowy model błony komórek raka piersi [5]. Zastosowano technikę Langmuira, GIXD, QCM, spektroskopię ATR oraz symulacje dynamiki molekularnej. Wykazano, że PTX oddziałuje ze wszystkimi składnikami błony, natomiast EPI przede wszystkim z jej ujemnie naładowanym składnikiem. Jednoczesne działanie obu leków prowadziło do wyraźnego upłynnienia błony, reorganizacji lipidów i tworzenia nieodwracalnych agregatów. Symulacje MD wskazały, że efekt ten może wynikać z powstawania klastrów cząsteczek leków wewnątrz dwuwarstwy.

Uzyskane wyniki dostarczają informacji o mechanizmach oddziaływania leków przeciwnowotworowych z błonami lipidowymi i mogą wspierać rozwój skuteczniejszych terapii skojarzonych oraz wyjaśnianie działań niepożądanych antracyklin.

[1] D. Matyszewska, *BBA Biomembranes*, 2020, 1862, 183104.

[2] D. Matyszewska, E. Nazaruk, R.A. Campbell, *J. Colloid Interf. Sci.* 2021, 581, 403–416.

[3] M. Zaborowska, D. Dziubak, P. Fontaine, D. Matyszewska, *Colloids Surfaces B: Biointerfaces* 2022, 211 112297.

[4] D. Matyszewska, D. Dziubak, M. Zaborowska-Mazurkiewicz, Z. Su, J. J. Leitch, J. Lipkowski, R. Bilewicz, *J. Phys. Chem. C* 2025, 129, 16756–16766.

[5] D. Dziubak, P. Kaczmarczyk, I. Leszczyńska, P. Batys, P. Fontaine, D. Matyszewska, *Langmuir*, 2025, 41, 27106–27122.



S09 WS14

Elektrochemicznie projektowane biointerfejsy elektrodowe - od mediatorów redoks do bezreagentowych biosensorów

Tomasz Rębiś^a, Zahrasadat Mousavi^a, Amanada Leda^b, Patrycja Płócienniczak^a

^a*Politechnika Poznańska, Wydział Technologii Chemicznej, Instytut Chemii i Elektrochemii Technicznej
ul. Berdychowo 4, 61-131 Poznań*

^b*Uniwersytet Łódzki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Nioorganicznej i Analitycznej,
ul. Tamka 12, 91-403 Łódź
tomasz.rebis@put.poznan.pl*

Rozwój nowoczesnych biosensorów elektrochemicznych wymaga projektowania materiałów elektrodowych zapewniających efektywny transfer elektronów pomiędzy enzymem a elektrodą oraz trwałą immobilizację wszystkich elementów aktywnych biologicznie. Szczególnie istotnym wyzwaniem pozostaje opracowanie uniwersalnych strategii funkcjonalizacji powierzchni elektrod umożliwiających konstrukcję stabilnych i bezreagentowych biosensorów.

Prowadzone badania koncentrują się na opracowaniu nowych metod elektrochemicznej modyfikacji powierzchni elektrod z wykorzystaniem związków naturalnych oraz elektrochemicznie indukowanych reakcji chemicznych. Opracowane strategie pozwalają na trwałe przyłączanie mediatorów redoks oraz projektowanie bioaktywnych interfejsów elektrodowych o kontrolowanych właściwościach elektrochemicznych. Szczególną uwagę poświęcono związkom fenolowym i ich pochodnym, które po elektrochemicznej aktywacji tworzą powierzchniowe ugrupowania chinonowe stanowiące wydajne mediatory utleniania NADH oraz platformę do dalszej funkcjonalizacji.

W ramach prowadzonych badań opracowano szereg nowych mediatorów elektrochemicznych przeznaczonych do biosensorów wykorzystujących dehydrogenazy glukozowe zależne od NAD⁺ i FAD oraz oksydazę glukozową. Zaproponowane rozwiązania obejmują zarówno niekowalencyjną funkcjonalizację materiałów węglowych poprzez oddziaływania π - π , jak i kowalencyjne przyłączanie cząsteczek z wykorzystaniem elektrochemicznie indukowanej reakcji addycji Michaela. Opracowane materiały umożliwiają efektywny transfer elektronów przy niskich potencjałach pracy oraz ograniczenie wpływu substancji interferujących.

Kulminacją prowadzonych badań było opracowanie nowej koncepcji bezreagentowego biosensora glukozy, w którym zrealizowano jednoczesne kowalencyjne unieruchomienie kofaktora NAD⁺ oraz dehydrogenazy glukozowej na nanostrukturalnym materiale elektrodowym. Zastosowanie pochodnych aminofenyloboronowych umożliwiło trwałe przyłączenie NAD⁺, natomiast elektrochemicznie indukowana addycja Michaela pozwoliła na integrację wszystkich elementów bioelektrokatalitycznych w obrębie jednej platformy elektrodowej.

Przedstawione wyniki pokazują, że elektrochemicznie projektowane biointerfejsy stanowią uniwersalną platformę do konstrukcji nowej generacji biosensorów enzymatycznych oraz otwierają możliwości projektowania wielofunkcyjnych materiałów elektrodowych przeznaczonych do zastosowań w bioelektrochemii, diagnostyce i analizie biomedycznej.



S09 WS15

Elektrochemiczna synteza, modyfikacja i charakterystyka warstw półprzewodnikowych do zastosowań fotoelektrochemicznych

Karolina Syrek, Sebastian Kotarba, Krzysztof Cichoń, Ewa Nowak*
Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków,
e-mail: karolina.syrek@uj.edu.pl; syrek@chemia.uj.edu.pl

Zapewnienie dostępu do czystych i odnawialnych źródeł energii stanowi jedno z kluczowych wyzwań współczesnej cywilizacji. W tym kontekście wodór zyskuje szczególne znaczenie jako paliwo o wysokiej gęstości energii, które podczas spalania nie generuje szkodliwych produktów ubocznych. Obecnie jego produkcja opiera się w zbyt dużym stopniu na wykorzystaniu źródeł nieodnawialnych. Zrównoważoną alternatywą metodą jest pozyskiwanie wodoru z wody z wykorzystaniem metod elektrochemicznych (ang. electrochemical, EC) – niewymagających światła – oraz metod fotokatalitycznych (ang. photocatalytic, PC) oraz fotoelektrochemicznych (ang. photoelectrochemical, PEC), które bazują na absorpcji promieniowania słonecznego [1].

Rozwój technologii opartych na tych procesach wymaga m.in. opracowania nowych, wysokowydajnych materiałów funkcjonalnych, które umożliwią konwersję energii słonecznej w energię chemiczną. W centrum zainteresowań badawczych znacznej części środowiska naukowego znajduje się projektowanie i synteza półprzewodnikowych materiałów nanostrukturalnych przeznaczonych do zastosowań w procesach PEC. Kluczowym elementem w tego typu układach są fotoelektrody, których efektywność zależy bezpośrednio od właściwości fizykochemicznych użytego materiału, jego składu, struktury krystalograficznej, ale także od jego morfologii, na którą w dużym stopniu wpływa metoda syntezy [2].

W ramach prezentacji omówione zostaną najnowsze osiągnięcia w zakresie elektrosyntezy funkcjonalnych materiałów półprzewodnikowych na bazie nanostrukturalnych tlenków TiO_2 i WO_3 [3,4], ich kompleksowa charakterystyka fizykochemiczna, a także różnorodne strategie modyfikacji powierzchni [5-8] i struktury tych materiałów, mające na celu poprawę ich efektywności w procesach fotoelektrochemicznych [9].

Podziękowanie: Badania współfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach projektu SONATA 19 (2023/51/D/ST4/01999).

- [1] C. Jiang, S.J.A. Moniz, A. Wang, T. Zhang, J. Tang, Chem. Soc. Rev. 46 (2017) 4645–4660.
- [2] J. Li, N. Wu, Catal. Sci. Technol. 5 (2015) 1360–1384.
- [3] K. Syrek, M.L. Kromer, N.B. Schorr, K. Cichoń, J. Rodríguez-López, G.D. Sulka, ACS Appl. Nano Mater. 7 (2024) 28273–28282.
- [4] K. Syrek, M. Zych, G.D. Sulka, J. Ind. Eng. Chem. 112 (2022) 316–322.
- [5] K. Syrek, M. Gurgul, M. Pisarek, K. Chrabąszcz, K. Malek, G. Sulka, J. Phys. Chem. C 128 (2024) 7679–7689.
- [6] S. Sultana, I. Darowska, M. Pisarek, G.D. Sulka, K. Syrek, ACS Appl. Mater. Interfaces 16 (2024) 49262–49274.
- [7] K. Syrek, J. Czopor, M. Topa-Skwarczyńska, M. Pilch, K. Kamiński, J. Ortyl, G.D. Sulka, J. Phys. Chem. C 127 (2023) 9471–9480.
- [8] K. Syrek, M. Zych, M. Pisarek, Ł. Gondek, M. Gurgul, R. Palowska, L. Liu, G.D. Sulka, J. Power Sources, 640 (2025) 236656.
- [9] K. Syrek, S. Kotarba, M. Zych, M. Pisarek, T. Uchacz, K. Sobańska, Ł. Pięta, G.D. Sulka, ACS Appl. Mater. Interfaces 16 (2024) 36752–36762.



S09 WS16

Spektroelektrochemia jako technika do badania potencjalnych leków przeciw Chorobie Alzheimera

Magdalena Z. Wiloch-Szyborska^a, Martin Perez Estebanez^b, Alvaro Colina^b, Martin Jönsson-Niedziółka^a

a) Instytut Chemii Fizycznej PAN, ul. Marcina Kasprzaka 44/52, 01-224, Warszawa

b) Facultad de Ciencias, Universidad de Burgos Pza. Misael Banuelos s/n. 09001. Burgos. Spain.

adres korespondencyjny; Instytut Chemii Fizycznej PAN, ul. Marcina Kasprzaka 44/52, 01-224, Warszawa

e-mail mwiloch@ichf.edu.pl

Choroba Alzheimera (AD) jest najczęstszą przyczyną otępienia u osób starszych, jednak nadal pozostaje chorobą nieuleczalną. Zrozumienie mechanizmów jej rozwoju ma kluczowe znaczenie dla opracowania skutecznych metod leczenia. Jedną z hipotez zakłada, że za rozwój AD odpowiadają peptydy z rodziny β -amyloidów ($A\beta$). Dotychczas najlepiej poznanymi przedstawicielami tej grupy są peptydy $A\beta(1-x)$, gdzie $x = 16, 40$ lub 42 reszty aminokwasowe. Peptydy $A\beta(1-x)$ wiążą jony miedzi(II), a w warunkach fizjologicznych kwas askorbinowy indukuje reakcję redoks $Cu(II)-A\beta(1-x)/Cu(I)-A\beta(1-x)$, prowadzącą do powstawania reaktywnych form tlenu (ROS) oraz reaktywnych form azotu (RNS). Związki te wykazują wysoką toksyczność wobec komórek nerwowych.

Substancje zdolne do usuwania jonów miedzi(II) z kompleksów β -amyloidów mogłyby ograniczać powstawanie ROS i RNS, a tym samym hamować procesy prowadzące do neurodegeneracji. Niedawno odkryto nową pochodną chinoliny, TDMQ20, o unikalnych właściwościach, jednak jej właściwości redoks pozostają słabo poznane, mimo że mogą odgrywać istotną rolę na wczesnym etapie oceny potencjalnych związków terapeutycznych.

Celem przeprowadzonych badań było wykorzystanie prężnie rozwijającej się techniki spektroelektrochemii (SEC), łączącej w jednym pomiarze dwie komplementarne metody: spektroskopię UV-Vis oraz woltamperometrię, do zbadania właściwości redoks związku TDMQ20. Zastosowanie tej techniki umożliwiło jednoczesną rejestrację zmian elektrochemicznych i spektroskopowych w próbce o objętości zaledwie $30\ \mu\text{L}$. Pozwoliło to na precyzyjne określenie produktów utleniania (potencjalnych metabolitów) powstających zarówno w objętości roztworu, jak i bezpośrednio przy powierzchni elektrody pracującej podczas przebiegu procesu redoks.

Zaproponowane badania spektroelektrochemiczne mogą mieć istotne znaczenie dla opracowania skuteczniejszych leków przeciwko chorobie Alzheimera. Wysoki odsetek niepowodzeń oraz ograniczona skuteczność niedawno zatwierdzonych terapii wskazują na potrzebę rozszerzenia badań przedklinicznych o nowe, dotychczas niewykorzystywane techniki analityczne, umożliwiające pełniejszą ocenę skuteczności i potencjalnej toksyczności kandydatów na leki.

Podziękowania:

Niniejsza praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu „Sonatina” nr 2021/40/C/ST4/00090



S09 WS17

Fotointerkalacja w materiałach warstwowych: kiedy pomaga, a kiedy szkodzi?

Mariusz Szkoda

*Katedra Chemii i Technologii Materiałów Funkcjonalnych, Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska
ul. Gabriela Narutowicza 11/1280-233 Gdańsk
mariusz.szkoda@pg.edu.pl*

Fotointerkalacja jest procesem, w którym nośniki ładunku generowane pod wpływem promieniowania inicjują lub wspomagają wnikanie jonów kompensujących ładunek do struktury materiału. Zjawisko to łączy w sobie elementy fotochemii, elektrochemii, transportu jonowego, fotochromizmu oraz magazynowania ładunku. Pomimo że fotointerkalacja była obserwowana w różnych materiałach, jej znaczenie w interpretacji właściwości fotokatalitycznych i fotoelektrochemicznych jest często niedoceniane.

Celem wystąpienia będzie pokazanie, że fotointerkalacja nie jest zjawiskiem jednoznacznie korzystnym ani jednoznacznie szkodliwym. Jej rola zależy od stopnia insercji jonów, odwracalności procesu, rodzaju materiału, składu elektrolitu oraz funkcji, jaką materiał pełni w danym układzie. Umiarkowana i odwracalna fotointerkalacja może działać jak funkcjonalne fotodomieszkowanie: zwiększać przewodnictwo, poprawiać separację ładunków, wydłużać czas życia elektronów, rozszerzać absorpcję światła oraz wspomagać aktywność fotokatalityczną. W takich układach insercja jonów może stabilizować fotowgenerowany ładunek i ograniczać rekombinację.

Z drugiej strony nadmierna lub nieodwracalna fotointerkalacja może prowadzić do efektów niekorzystnych. Fotowgenerowane elektrony mogą być zużywane na redukcję struktury i insercję kationów zamiast uczestniczyć w zewnętrznym transporcie ładunku. Może to powodować spadek fotoprądu, tworzenie pułapek rekombinacyjnych, blokowanie miejsc aktywnych, deformację struktury oraz stopniową dezaktywację fotoelektrody. Jest to szczególnie istotne w fotoelektrochemicznym rozszczepianiu wody, gdzie efektywna ekstrakcja elektronów jest kluczowa dla działania fotoanody.

W prezentacji omówione zostaną przykłady dotyczące fotointerkalacji w układach WO_3 i MoO_3 . Szczególna uwaga zostanie poświęcona wpływowi kationów alkalicznych na aktywność krystalicznego i amorficznego WO_3 , fotointerkalacji K^+ do fotoanod MoO_3/FTO oraz możliwości ograniczania negatywnych skutków tego procesu poprzez projektowanie heterozłączy $\text{MoO}_3/\text{BiVO}_4$. Zaproponowana zostanie koncepcja równowagi między korzystnym fotodomieszkowaniem a fotoindukowaną degradacją jako praktyczne podejście do projektowania i interpretacji właściwości materiałów fotoaktywnych.

Podziękowania

Badania finansowane są ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach projektu SONATA pt. „Czy fotointerkalacja negatywnie wpływa na wydajność fotoanod? Poszukiwanie skutecznych metod zmniejszenia negatywnego efektu fotointerkalacji w materiałach warstwowych”, nr UMO-2023/51/D/ST4/00297.



S09 WS18

Ocena degradacji tlenkowych ogniów paliwowych bezpośrednio zasilanych biogazem na podstawie pomiarów *in situ* składu gazów wylotowych i parametrów elektrycznych

Beata Bochentyn¹, Kinga Kujawska, Jakub Zdankiewicz, Michał Dominów, Jakub Karczewski

Politechnika Gdańska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej;
80-233 Gdańsk, ul. G. Narutowicza 11/12;
e-mail: beata.bochentyn@pg.edu.pl

Tlenkowe ogniwa paliwowe (SOFC) dzięki wysokiej temperaturze pracy umożliwiają bezpośrednie wykorzystanie paliw węglowodorowych, w tym biogazu, bez konieczności stosowania zewnętrznego reformera. Bezpośrednie zasilanie ogniów biogazem wiąże się jednak z równoczesnym przebiegiem wielu reakcji reformingu i reakcji elektrochemicznych, a także z ryzykiem osadzania się węgla na anodzie Ni-YSZ, co może prowadzić do stopniowej degradacji ogniwa. Z tego względu istotne jest prowadzenie pomiarów *in situ*, pozwalających na bieżąco śledzić zarówno parametry elektryczne pracy ogniwa, jak i zmiany składu gazów wylotowych z przestrzeni anodowej.

Podczas wystąpienia omówiona zostanie metoda ilościowej analizy składu gazów wylotowych z wykorzystaniem spektroskopii w podczerwieni z transformacją Fouriera (FTIR), którą zastosowano w badaniach długoterminowych pracy ogniów SOFC zasilanych syntetycznym biogazem. W trakcie około 90-godzinnego testu rejestrowano charakterystyki prądowo-napięciowe oraz gęstość prądu przy stałym napięciu 0,65 V, równocześnie wykonując pomiary FTIR umożliwiające wyznaczenie zawartości CH₄, CO₂, CO i H₂ w gazach wylotowych. Na podstawie zmian składu gazów określono również stopień konwersji CH₄ i CO₂, wydajność i selektywność tworzenia CO i H₂ oraz bilans węgla, uzyskując informacje o zmianach efektywności reformingu wewnętrznego zachodzących podczas pracy ogniwa. Zaobserwowano stopniowy wzrost udziału nieprzereagowanego CH₄ i CO₂ oraz zmniejszenie ilości produktów reformingu, wskazujące na pogarszającą się efektywność bezpośredniego reformingu wewnętrznego. Co istotne, zmiany składu gazów i parametrów reformingu pojawiały się również w okresie, w którym gęstość prądu pozostawała niemal niezmienna, pokazując, że sam pomiar parametrów elektrycznych nie zawsze pozwala na wczesne rozpoznanie zmian zachodzących w układzie. Ponadto, przeprowadzona dodatkowo analiza nierównowagowa pozwoliła określić kierunek reakcji reformingu oraz zidentyfikować te najbardziej dominujące. Wykazano, że w zastosowanych warunkach szczególnie korzystny był reforming parowy metanu, natomiast spośród reakcji prowadzących do odkładania węgla największe znaczenie miała piroliza metanu.

Uzyskane wyniki pokazują, że korelacja pomiarów elektrycznych z prowadzoną *in situ* analizą składu gazów wylotowych dostarcza znacznie pełniejszej informacji o procesach zachodzących na anodzie niż analiza parametrów elektrycznych prowadzona niezależnie. Połączenie obu metod może zatem stanowić użyteczne narzędzie diagnostyczne do oceny zmian efektywności reformingu, identyfikacji procesów prowadzących do degradacji oraz monitorowania stanu tlenkowych ogniów paliwowych podczas ich długotrwałej pracy w trakcie zasilania paliwami innymi niż czysty wodór.



S09 WS19

Spektroskopia impedancyjna szybkich procesów elektrodowych: podpotencjałowa adsorpcja wodoru na platynie

Paweł Kulboka, Piotr Połczyński, Rafał Jurczakowski

Uniwersytet Warszawski Wydział Chemii;
Ul. Pasteura 1, 02-093 Warszawa;
rafjur@chem.uw.edu.pl

Sorpcja wodoru w metalach z grupy platynowców ma istotne znaczenie dla katalizy heterogenicznej, reakcji uwodornienia oraz technologii związanych z konwersją i magazynowaniem energii. Podpotencjałowa adsorpcja wodoru (H-UPD) na platynie należy do najszybszych znanych procesów elektrodowych i stanowi unikatowy układ modelowy do badań dynamiki granicy faz elektroda/roztwór elektrolitu. Szybka kinetyka elektrodowa procesu H-UPD stawia wyzwania dla klasycznych metod pomiarowych stosowanych w układach elektrochemicznych, w których odpowiedź kinetyczna jest maskowana przez czynniki eksperymentalne, zarówno sprzętowe, jak i geometryczne. Analiza danych dostępnych w literaturze wskazuje na duże rozbieżności pomiędzy danymi kinetycznymi elektrosorpcji wodoru na elektrodzie platynowej. Wartości oporu przeniesienia ładunku związane z procesem, rzędu $\text{m}\Omega \cdot \text{cm}^2$, są znacznie mniejsze od oporu elektrolitu. Z kolei ograniczenia czasowe odpowiedzi potencjostatu w zakresie wysokich częstotliwości oraz niejednorodności pola elektrycznego powodują pojawienie się szeregu artefaktów i deformacji widm impedancyjnych.

Na wykładzie przedstawione zostaną wyniki badań impedancyjnych podpotencjałowej adsorpcji wodoru na platynie z wykorzystaniem metod pozwalających na identyfikację, minimalizację lub eliminację niekorzystnych efektów eksperymentalnych ograniczających możliwość badania szybkich procesów sorpcyjnych. Podejście to umożliwiło analizę bardzo szybkich procesów elektrodowych w zakresie częstotliwości sięgającym MHz oraz wyznaczenie parametrów kinetycznych i termodynamicznych granicy faz dla powierzchni polikrystalicznych oraz Pt(111) w roztworach protycznych.

Szczególna uwaga zostanie poświęcona zidentyfikowanym źródłom dyspersji częstotliwościowej obserwowanej w pomiarach elektrochemicznych i opisywanej za pomocą elementu stałofazowego CPE (ang. *Constant Phase Element*). Omówiona zostanie możliwość rozdzielenia efektów wynikających z niejednorodności układu od rzeczywistej odpowiedzi elektrochemicznej granicy faz. Wyniki badań podpotencjałowej elektrosorpcji wodoru dostarczają nowych informacji o dynamice granicy faz elektroda/roztwór elektrolitu oraz o fizycznym pochodzeniu dyspersji częstotliwościowej obserwowanej w układach elektrochemicznych.



S09 WS20

Praktyczne wyzwania w projektowaniu kaset do zautomatyzowanej elektrochemicznej immunodetekcji biomarkerów

Marcin Drozd^{1,2}, Kinga Rauch¹, Karolina Porycka^{1,2}, Natalia Lewenko^{1,2}, Katarzyna Tokarska¹, Kamil Żukowski¹, Daniel Janczak^{1,3}, Małgorzata Jakubowska^{1,3}, Elżbieta Malinowska^{1,2}, Mariusz Pietrzak^{1,2}

1 Centrum Zaawansowanych Materiałów i Technologii CEZAMAT, Politechnika Warszawska, ul. Poleczki 19, 02-822 Warszawa

2 Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska, ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa

3 Wydział Mechaniczny Technologiczny, Politechnika Warszawska, ul. Narbutta 85, 02-524 Warszawa

e-mail: marcin.drozd.ch@pw.edu.pl

Rozwój nowoczesnej immunodiagnostyki w formacie Point-of-Care (POC) jest determinowany rosnącym zapotrzebowaniem na szybkie, tanie i jednorazowe narzędzia analityczne. Są one przydatne zarówno w rutynowym oznaczaniu biomarkerów, jak i w zastosowaniach specjalnych czy polowych. Wyjątkowo atrakcyjnym rozwiązaniem pod względem elastyczności prototypowania oraz łatwości skalowania i produkcji masowej są zminiaturyzowane systemy kasetowe wytwarzane z wykorzystaniem technologii obróbki materiałów cienkowarstwowych, takich jak cięcie laserowe i niskotemperaturowa laminacja podłoży polimerowych (np. PET). Co istotne, technologie te są wysoce kompatybilne z planarnymi elektrodami wytwarzanymi metodą sitodruku, co umożliwia integrację modułu mikroprzepływowego z przetwornikiem elektrochemicznym.

Pełna automatyzacja procedury analitycznej w warunkach przepływowych wiąże się jednak z szeregiem wyzwań technologicznych i inżynierskich. Wytworzenie kasety diagnostycznej z detekcją elektrochemiczną wymaga nie tylko przeniesienia protokołu heterofazowego testu immunoenzymatycznego do mikrostruktury kasety, ale również zapewnienia precyzyjnej kontroli przepływu przy minimalizacji liczby manualnych etapów operacyjnych. Równie istotną kwestią pozostaje opracowanie niezawodnej strategii odczytu sygnału woltamperometrycznego oraz jego automatycznego przetwarzania w wiarygodny rezultat analityczny.

W ramach prezentacji omówione zostaną kluczowe problemy oraz wybrane autorskie strategie ich rozwiązań możliwe do zastosowania w zminiaturyzowanych kasetowych systemach typu *Lab-on-a-Foil* z woltamperometrycznym odczytem sygnału. Na przykładach powszechnie stosowanych znaczników (fosfataza, peroksydaza) zaprezentowane zostaną metody kompensacji błędów wynikających z naturalnej zmienności powierzchni elektrod sitodrukowanych oraz niespecyficznego adsorpcji składników złożonych matryc biologicznych. Ponadto omówione zostaną praktyczne aspekty, takie jak wpływ formulacji i sposobu przechowywania substratów reakcji enzymatycznej w kasce na stabilność i jakość uzyskiwanego sygnału elektrochemicznego. Szczególny nacisk zostanie położony na zapewnienie kompatybilności metody detekcji z algorytmami automatycznej interpretacji sygnału. Kwestie te są krytyczne z punktu widzenia miniaturyzacji układów pomiarowych, integracji kaset z przenośnymi czytnikami wyposażonymi w mini-potencjostaty oraz ich wdrożenia w rzeczywistych testach diagnostycznych.

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w ramach Programu Operacyjnego Inteligentny Rozwój (grant POIR.01.01.01-00-0638/20 „Opracowanie konstrukcji i technologii wytwarzania miniatury urządzeń diagnostycznych do szybkiego wykrywania wirusa SARS-CoV-2 w trybie POCT - ImGen”) oraz Politechnikę Warszawską w ramach programu Inicjatywa Doskonałości, Uczelnia Badawcza - IDUB (grant LIDER POB BIB 2 „Opracowanie systemu mikroprzepływowego do wysokoczułej immunodetekcji wybranych biomarkerów stanu zapalnego w oparciu o strategię elektrochemicznej detekcji *in-situ*”).



S09 WS21

Drukowane układy elektrod jonoselektywnych do analizy środowiskowej i biomedycznej

Łukasz Górski

*Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska;
ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa;
e-mail: lukasz.gorski@pw.edu.pl*

W niniejszej prezentacji przedstawione zostaną możliwości wytwarzania miniaturowych sensorów potencjometrycznych z wykorzystaniem zaawansowanych technik drukarskich. Opisane zostaną przykłady zastosowań tego typu sensorów w analizie biomedycznej i środowiskowej, opracowane w ramach dwu projektów NCBR.

W efekcie prac nad projektem "Funkcjonalne materiały kompozytowe do drukowalnych sensorów do telerehabilitacji" (Techmatstrateg-III) opracowano urządzenie w formie elektroniki naskórnej, umożliwiające pomiar stężenia mleczanów i pH w pocie, bezpośrednio na skórze człowieka. Zastosowaniem tych czujników, drukowanych na elastycznej folii naklejanej na skórę, jest monitorowanie wysiłku u sportowców oraz pacjentów poddawanych rehabilitacji. Na szczególną uwagę zasługuje opracowana elektroda do oznaczania jonów mleczanowych, będący rzadkim przykładem nieenzymatycznego, potencjometrycznego sensora tych jonów.

W projekcie „Autonomiczny System Internetu Rzeczy (IoT) do Monitorowania Jakości Wód oraz Operacyjnego Wspomagania Identyfikacji Zagrożeń” (Hydrostrateg-II) opracowywane są zestawy sensorów potencjometrycznych (tzw. mikrotaśmy), zaprojektowane do wieloparametrowej analizy próbek wody w środowisku naturalnym. Przeznaczone do monitorowania jonów chlorkowych, azotanowych(V), amonowych oraz pH, mikrotaśmy te stanowią kluczowy element systemów pomiarowych zintegrowanych z bojami rzeczny. Ich zadaniem będzie ciągły monitoring jakości wody oraz szybkie wykrywanie potencjalnych zagrożeń, w tym ryzyka katastrof ekologicznych. Innowacyjna konstrukcja mikrotaśm umożliwi ich automatyczną kalibrację, analizę próbek oraz sprawną wymianę zużytych sensorów - wszystko to bezpośrednio wewnątrz boi, bez konieczności ingerencji operatora.

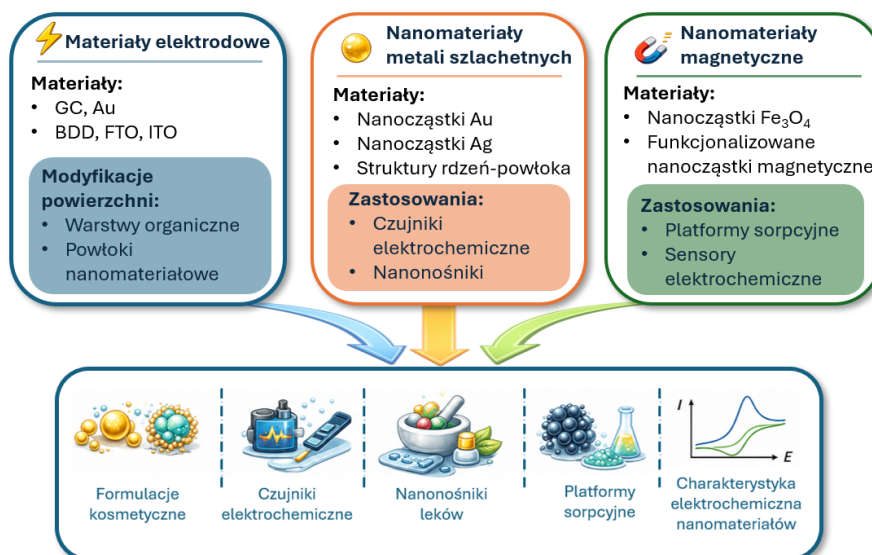
Obydwa opisane powyżej typy urządzeń zawierają, oprócz elektrod jonoselektywnych, drukowane elektrody referencyjne z membranami polimerowymi zawierającymi ciecz jonową. Badaniom nad tymi elektrodami zostanie poświęcona osobna część prezentacji.

Elektrochemia i nanotechnologia – synergia prowadząca do nowych rozwiązań analitycznych

Anna Wcisło, Piotr Świder, Elżbieta Adamska, Agata Kowalska, Beata Grobelna

*Katedra Chemii Analitycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański
Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk
e-mail:anna.wcislo@ug.edu.pl*

Elektrochemia i nanotechnologia należą do najszybciej rozwijających się obszarów współczesnej nauki, a ich wzajemne przenikanie prowadzi do powstawania nowych materiałów, metod badawczych i rozwiązań aplikacyjnych. Nanomateriały, dzięki unikalnym właściwościom fizykochemicznym wynikającym z ich rozmiaru, rozwiniętej powierzchni właściwej oraz możliwości funkcjonalizacji, znacząco rozszerzają możliwości współczesnej elektrochemii. Jednocześnie techniki elektrochemiczne stanowią czułe, szybkie i wszechstronne narzędzie umożliwiające projektowanie, charakterystykę oraz badanie procesów zachodzących z udziałem nanomateriałów.



Wykład będzie poświęcony przykładom obrazującym wzajemne oddziaływanie obu dziedzin. Przedstawione zostanie wykorzystanie nanomateriałów do modyfikacji powierzchni elektrod, prowadzące do poprawy parametrów analitycznych układów elektrochemicznych, a także zastosowanie metod elektrochemicznych do badania właściwości i funkcjonalności nanomateriałów. Omówione zostaną nanomateriały oparte na magnetycie, umożliwiające monitorowanie procesów sorpcji i oddziaływań powierzchniowych, nanonośniki leków pozwalające śledzić procesy wiązania i kontrolowanego uwalniania substancji elektroaktywnych oraz nanostruktury bimetaliczne, których skład, właściwości powierzchniowe i aktywność mogą być skutecznie oceniane z wykorzystaniem metod elektrochemicznych.

Przedstawione przykłady pokazują, że połączenie elektrochemii i nanotechnologii wykracza poza klasyczne wykorzystanie nanomateriałów jako materiałów elektrodowych. Synergia obu dziedzin umożliwia nie tylko projektowanie coraz bardziej zaawansowanych układów analitycznych, lecz także dostarcza nowych narzędzi do badania zjawisk zachodzących na poziomie nano. Kierunek ten otwiera szerokie perspektywy rozwoju nowoczesnej analityki, materiałoznawstwa, nanomedycyny czy ochrony środowiska.

***In-Situ* Raman Spectroscopy of Anodic Nanotubes – Battery Applications**

Damian Kowalski

Faculty of Chemistry, University of Warsaw, Poland
 damian.kowalski@chem.uw.edu.pl

Anodization is a high-voltage electrochemical conversion process that forms barrier-type oxide layers¹ and self-organized nanoporous/nanotubular structures^{2,3}. So far, the Al₂O₃-like nanopores and TiO₂-like nanotubes could be successfully synthesized on valve metals and alloys. Recently, it has become possible to form nanotubular structures on iron and consequently control the ratio of hematite (Fe₂O₃) to magnetite (Fe₃O₄) by subsequent thermal treatment. Electrochemically active nanotubes are of high interest in the battery field due to a unique one-dimensional (1D) geometry, offering high volume expansion tolerance, and applications without binders and conductive additives. Herein, we report an *in-situ* Raman spectroscopy study for a better fundamental understanding of Li⁺/Na⁺ storage in nanotubes and correlate the structural fingerprints with the electrochemical data on differential capacity plots of $d(Q-Q_0)/dE$.⁴ Real-time measurements revealed that the nanotubes had undergone two major phase transformations with increasing lithium content, disclosing the sequential steps of a lithium intercalation-type storage. In contrast, sodium-ion insertion induced no significant crystal structure modification but instead a slight crystallinity rupture, signifying a dominant nondiffusion-limited capacitive type of storage. The insight into the charge storage in metal-ion and metal-air batteries will be discussed.⁴⁻⁶

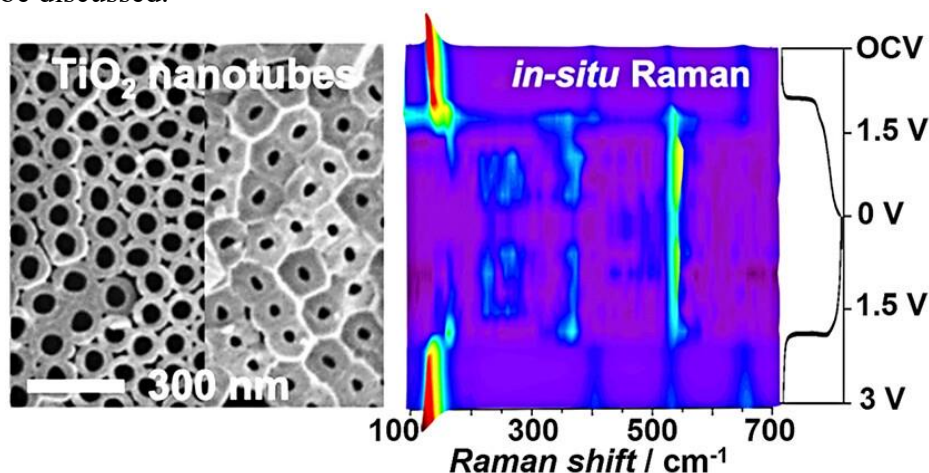


Figure 1. *In-situ* Raman spectroscopy patterns of Li-ion insertion to TiO₂ nanotubular electrode. Raman spectra were collected using a Thermo Scientific DXR3 Raman microscope fitted with a 532 nm laser equipped with an *in-situ* ECC-OPTO EI-Cell.⁴

- [1] D. Kowalski, Y. Aoki, H. Habazaki, *Angewandte Chemie*, 2009 121, 7718.
- [2] D. Kowalski, P. Schmuki, *Chemical Communications*, 2010, 46, 8585.
- [3] D. Kowalski, D. Kim, P. Schmuki, *Nano Today*, 2013, 8, 235-264.
- [4] M. Vincent and D. Kowalski, *ACS Applied Nano Materials*, 2023, 6, 6528-6537.
- [5] S. Sajeev, M. Vincent, P. Garbacz, M. Strawski, C. Zhu, Y. Aoki, D. Kowalski, *RSC Applied Interfaces*, 2025, 2, 1051.
- [6] M. Srivastava, S. Sajeev, A. Srivastava, W. Kepinski, D. Kowalski, *Electrochimica Acta*, 2026, 148472.

The work was financially supported by National Science Centre, grant OPUS 20 no. 2020/39/B/ST4/02548, grant OPUS 28 no. 2024/55/B/ST4/02569 and NCBiR the European Interest Group (EIG) CONCERT-Japan.



Komunikaty sekcyjne



S09 KS01

Mechanizm elektrochemicznego utleniania noskapy na elektrodach diamentowych domieszkowanych borem i jego wykorzystanie analityczne

Olha Dushna^{1*}, Andrzej Gawor¹, Liliya Dubenska², Marian Vojs³, Ewa Bulska¹

¹Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych,
ul. Żwirki i Wigury 101, 02-089 Warszawa, Polska

²Lwowski Uniwersytet Narodowy im. Iwana Franki, Wydział Chemii, Katedra Chemii Analitycznej,
ul. Kyryla i Mefodiya 6, 79005 Lwów, Ukraina

³Słowacki Uniwersytet Techniczny w Bratysławie, Wydział Elektrotechniki i Informatyki,
Instytut Elektroniki i Fotoniki, Ilkovičova 3, 812 19 Bratysława, Słowacja

e-mail: o.dushna@uw.edu.pl

Noskapina jest naturalnym alkaloidem benzylozochinolinowym występującym w maku lekarskim (*Papaver somniferum*), stosowanym przede wszystkim jako substancja o działaniu przeciwkaszlowym. Jej obecność w produktach farmaceutycznych, materiałach biologicznych oraz próbkach o znaczeniu kryminalistycznym uzasadnia potrzebę opracowywania szybkich, czułych i wiarygodnych metod oznaczania. Jednocześnie mechanizm elektrochemicznego utleniania noskapy oraz charakter powstających produktów transformacji nie zostały dotychczas szczegółowo poznane. Celem pracy było scharakteryzowanie przebiegu procesów elektrodowych noskapy na elektrodach diamentowych domieszkowanych borem oraz wykorzystanie uzyskanych wyników do opracowania zminiaturyzowanej metody elektroanalizy.

Badania przeprowadzono z zastosowaniem stacjonarnej elektrody diamentowej domieszkowanej borem (BDDE) oraz sitodrukowanej elektrody diamentowej domieszkowanej borem (SP/BDDE). Charakterystykę elektrochemiczną noskapy wykonano z wykorzystaniem woltamperometrii cyklicznej, woltamperometrii impulsowej różnicowej, woltamperometrii fali prostokątnej oraz chronoamperometrii. Badany związek ulegał dwuetapowemu, elektrochemicznie nieodwracalnemu utlenianiu, prowadzącemu do powstania dwóch dobrze rozdzielonych sygnałów anodowych, obserwowanych przy potencjałach około +0,90 V oraz +1,25 V w buforze Brittona-Robinsona o pH 5 oraz w 0,1 M roztworze HClO₄.

W celu pogłębionej interpretacji mechanizmu przemian elektrochemicznych noskapy przeprowadzono elektrolizę przy potencjałach odpowiadających obu etapom utleniania. Eksperymenty wykonano w dwóch mediach elektrolitycznych: buforze Brittona-Robinsona o pH 5 oraz 0,1 M HClO₄. Produkty elektrogenerowane podczas elektrolizy poddano następnie analizie z wykorzystaniem wysokorozdzielczej spektrometrii mas. Zastosowane podejście umożliwiło wstępną identyfikację produktów utleniania oraz zaproponowanie prawdopodobnych ścieżek transformacji noskapy.

Na podstawie scharakteryzowanego zachowania elektrochemicznego noskapy opracowano procedurę jej oznaczania. Liniowe zależności kalibracyjne uzyskano w zakresie stężeń od 1,5 do 200 μM. Granice wykrywalności wyznaczone metodą woltamperometrii impulsowej różnicowej wynosiły odpowiednio 0,54 i 0,46 μM dla pierwszego i drugiego sygnału utleniania. Zastosowanie miniaturowej elektrody SP/BDDE umożliwiło przeprowadzenie oznaczenia przy wykorzystaniu zaledwie 70 μL próbki. Przydatność opracowanej procedury potwierdzono w analizie napoju tonizującego, koniaku, śliny oraz modelowych mieszanin symulujących próbki o znaczeniu kryminalistycznym. Opracowana platforma łączy możliwość prowadzenia badań mechanistycznych z szybkim i zminiaturyzowanym oznaczaniem noskapy, wykazując potencjał zastosowania w analizie farmaceutycznej, biologicznej i sądowej.

Zależność struktura-właściwości elektrokatalityczne nanocebulek węglowych – porównanie klasycznej pirolizy i syntezy mikrofalowej wspomaganej wolframem

Marcin Zajac, Marta E. Płońska-Brzezińska

Zakład Chemii Organicznej, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku; ul. Mickiewicza 2A, 15-222 Białystok;
marcin.zajac@umb.edu.pl

Nanocebunki węglowe (z ang. Carbon Nano-Onion, CNO) stanowią obiecującą grupę nanostruktur węglowych przeznaczonych do zastosowań elektrokatalitycznych. Dzięki rozwiniętej powierzchni właściwej oraz możliwości kontrolowania stopnia grafityzacji, liczby defektów i składu chemicznego powierzchni wykazują one wysoką aktywność wobec reakcji redukcji tlenu (z ang. Oxygen Reduction Reaction, ORR). Właściwości te w znacznym stopniu zależą od metody ich otrzymywania, które decydują o strukturze CNO oraz dostępności centrów aktywnych (1).

Celem niniejszych badań było porównanie wpływu dwóch metod otrzymywania CNOs z nanodiamentu (średnica ok. 5 nm) – klasycznej pirolizy wysokotemperaturowej Kuznetsova (Rys. 1a) oraz syntezy mikrofalowej wspomaganej wolframem (Rys. 1b) – na ich właściwości elektrokatalityczne wobec ORR (2,3). Szczególną uwagę poświęcono analizie mechanizmu reakcji ORR z wykorzystaniem wirującej elektrody pierścieniowo-dyskowej (z ang. Rotating Ring-Disk Electrode, RRDE), umożliwiającą jednoczesne wyznaczenie liczby elektronów uczestniczących w procesie oraz ilości powstającego nadtlenu wodoru.



Rys. 1. Porównanie otrzymywania CNOs: a) metoda Kuznetzowa; b) synteza mikrofalowa wspomagana wolframem.

CNOs otrzymano z trzech rodzajów nanodiamentu o odmiennej chemii powierzchni metodą pirolizy w temperaturach 1150 i 1650 °C oraz metodą mikrofalową z wykorzystaniem wolframu jako inicjatora plazmy i lokalizatora pola elektromagnetycznego. Strukturę otrzymanych materiałów scharakteryzowano metodami wysokorozdzielczej transmisyjnej mikroskopii elektronowej oraz rentgenowskiej spektroskopii fotoelektronowej, natomiast właściwości elektrokatalityczne oceniono metodą RRDE w środowisku alkalicznym.

Uzyskane wyniki wykazały, że sposób syntezy istotnie wpływa na strukturę CNO oraz przebieg ORR. CNO o wyższym stopniu grafityzacji i lepszej przewodności elektrycznej wykazywały większe prądy graniczne, liczbę elektronów zbliżoną do czterech oraz niższą wydajność tworzenia H₂O₂. Przeprowadzone badania potwierdzają, że dobór metody syntezy umożliwia kontrolowanie właściwości strukturalnych CNO, a tym samym projektowanie wydajnych elektrokatalizatorów ORR.

Literatura: (1) McDonough & Gogotsi, *Interface*, 2013 (2) Zajac et al., *ACS Appl. Nano Mater.*, 2026 (3) Płońska-Brzezińska et al., *Carbon*, 2026

Podziękowanie: Projekt finansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki, nr grantu 2023/49/B/ST5/02403 oraz 2019/35/B/ST5/00572 (M.E.P-B).

Synteza polimerów wybranych pochodnych karbazolu i badanie wpływu struktury monomeru na zachowanie elektrochemiczne powstałych warstw

Julia Owczarska,^a Renata Rybakiewicz-Sekita,^b Roman Gańczarczyk,^c Sandra Pluczyk-Malek,^d Agnieszka Powała,^e Teresa Żolek,^e Krzysztof Noworyta^{a,*}

^a Instytut Chemii Fizycznej PAN,
ul. Kasprzaka 44/52 01-224 Warszawa,
jowczarska@ichf.edu.pl

^b Instytut Matematyki, Wydział Matematyczno-Przyrodniczy, Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego
ul. Kazimierza Wójcickiego 1/3, 01-938 Warszawa

^c Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny,
ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa

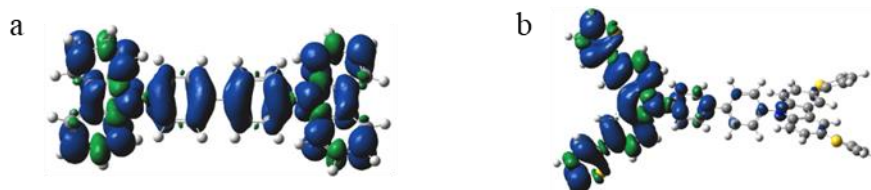
^d Katedra Fizykochemii i Technologii Polimerów, Wydział Chemiczny, Politechnika Śląska,
ul. ks. M. Strzody 9, 44-100 Gliwice

^e Zakład Chemii Organicznej i Fizycznej, Wydział Farmaceutyczny, Warszawski Uniwersytet Medyczny,
Banacha 1, 02-097 Warszawa

Projektowanie nowoczesnych materiałów elektrochromowych, o potencjalnym zastosowaniu w inteligentnych przeszkleniach, wyświetlaczach czy elastycznych ogniwach, wymaga precyzyjnej kontroli ich właściwości optycznych i elektrycznych. Wprowadzanie odpowiednich zmian strukturalnych w polimerze pozwala na kontrolowanie tych właściwości. Matryce oparte na rdzeniu karbazolowym charakteryzują się wysoką stabilnością termiczną oraz szerokim wachlarzem możliwych modyfikacji chemicznych, co czyni je bardzo dobrymi kandydatami do zastosowań w elektronice organicznej.

W ramach niniejszej pracy otrzymano serię cienkich warstw polimerowych wykorzystując pięć monomerów karbazolowych różniących się strukturą. Warstwy te osadzone zostały na drodze elektropolimeryzacji potencjodynamicznej. Otrzymane warstwy zostały scharakteryzowane elektrochemicznie i spektralnie. W szczególności, badania elektrochemiczne wykazały, że monomery z fragmentem tiofenowym tworzą łańcuchy o większym zasięgu sprzężenia. Dużą uwagę poświęcono ocenie morfologii powierzchni warstw przy użyciu mikroskopii sił atomowych (AFM), co pozwoliło na analizę wpływu budowy monomeru na porowatość warstw. Zastosowanie zaawansowanych obliczeń kwantowo-mechanicznych pozwoliło na lepsze zrozumienie uzyskanych wyników uzyskanych wyników eksperymentalnych, w szczególności w zakresie lokalizacji powstających kationorodników (Rys. 1). Podjęto również próby zbadania właściwości elektrochromowych otrzymanych materiałów w celu oceny możliwości ich zastosowań jako materiałów elektrochromowych.

Uzyskane wyniki stanowią podstawę do świadomego projektowania funkcjonalnych materiałów karbazolowych o zoptymalizowanych parametrach pracy.



Rysunek 3. Wizualizacja rozmieszczenia gęstości spinów w kationorodnikach monomerów: (a) Carb-Phe-Phe-Carb, (b) Th-Carb-Phe-Phe-Carb-Th.

Podziękowania: Autorzy składają podziękowania Narodowemu Centrum Nauki (NCN), grant OPUS25 2023/49/B/NZ7/02718 za finansowanie badań.



Sesja posterowa



S09 PS01

Innowacyjna konstrukcja potencjometrycznej elektrody jonoselektywnej do oznaczania Pb^{2+} z wykorzystaniem zespołu mikroelektrod złotych

Klaudia Morawska¹, Cecylia Wardak¹

¹Uniwersytet Marii Curie Skłodowskiej, Wydział Chemii, Instytut Nauk Chemicznych, Katedra Chemii Analitycznej, Pl. Marii Curie Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin
e-mail: klaudia.morawska@mail.umcs.pl

Potencjometria to jedna z częściej wykorzystywanych technik w elektrochemii. W tej technice wyznaczamy różnicę potencjałów między elektrodą odniesienia, a elektrodą wskaźnikową w warunkach bezprądowych^[1]. Jako elektrody wskaźnikowe stosuje się elektrody jonoselektywne, które z reguły dzielimy na dwie główne grupy – z ciekłym oraz stałym kontaktem. W dobie rozwoju technologicznego oraz poszukiwania tanich i ekologicznych rozwiązań coraz częściej wykorzystuje się elektrody ze stałym kontaktem^[2]. Dzięki eliminacji elektrolitu wewnętrznego mogą zostać one zminiaturyzowane, kreowany jest dowolny kształt, a ponadto można z ich zastosowaniem prowadzić pomiary terenowe. Postęp konstrukcyjny sprawił, że nastąpił wzrost różnorodności stosowanych podłoży elektrodowych. W tym celu wykorzystuje się nie tylko makropodłoża tj. węgiel szklisty, złoto, ale również elektrody pastowe, sitodrukowane oraz mikroelektrody^[3,4]. Warto nadmienić, że dla klasycznej makroelektrody transport analitu zachodzi głównie na drodze dyfuzji liniowej (planarnej), natomiast w zespole mikroelektrod złotych dominuje dyfuzja sferyczna (radialna), zapewniająca bardziej efektywny transport analitu, szybsze ustalenie warunków pomiarowych oraz lepszą odpowiedź elektrochemiczną. Dzięki temu uzyskujemy sprawniejszy proces przenoszenia ładunków i tym samym lepszą stabilność oraz odwracalność wskazań bez konieczności dodatkowej modyfikacji tych czujników^[5].

W niniejszej pracy przedstawiono zastosowanie innowacyjnego podłoża składającego się z układu kilkuset złotych mikroelektrod. Podłoże tego typu zastosowano z sukcesem jako elektrodę wyprowadzającą w jonoselektywnych elektrodach potasowych i azotanowych^[5]. W prezentowanych badaniach przedstawiono wykorzystanie podobnego podłoża różniącego się kształtem i rozmieszczeniem pojedynczych mikroelektrod do konstrukcji ołowiowych czujników potencjometrycznych. Selektyność względem jonów ołowiu zapewniała membrana jonoczuła, która w swoim składzie zawierała jonofor ołowiu (IV). Oprócz obrazowania powierzchni elektrody z wykorzystaniem mikroskopu optycznego wykonano szereg badań elektrochemicznych z zastosowaniem potencjometrii. Wyznaczono podstawowe parametry analityczne, tj. nachylenie charakterystyki, granicę wykrywalności, zakres liniowości oraz powtarzalność działania elektrody. Ponadto wyznaczono dryft potencjału, na podstawie którego dokonano oceny stabilności potencjału. Dodatkowo oceniono odwracalność potencjału, a także przeprowadzono test warstwy wodnej, który wykazał brak tworzenia się niepożądanego warstwy wody na granicy faz między membraną a podłożem elektrody, co jest dodatkowym atutem prezentowanej elektrody.

Przeprowadzone badania potwierdzają uniwersalność innowacyjnego podłoża elektrodowego.

1. E. Zdrachek, E. Bakker, *Anal. Chem.* **2019**, 91, 2.
2. A. K. Covington, R. G. Bates, *C R C Critical Reviews in Analytical Chemistry* **1973**, 3, 355.
3. C. Wardak, K. Pietrzak, K. Morawska, M. Grabarczyk, *Sensors* **2023**, 23, 5839.
4. G. Dimeski, T. Badrick, A. S. John, *Clinica Chimica Acta* **2010**, 411, 309.
5. K. Morawska, K. Pietrzak, C. Wardak, *Materials* **2026**, 19, 1238.



S09 PS02

Wpływ składu warstwy mediacyjnej na właściwości elektrod jonoselektywnych ze stałym kontaktem otrzymanym z nanocząstek ZnO domieszkowanych różnymi metalami - badania porównawcze

Klaudia Morawska¹, Cecylia Wardak¹, Karolina Pietrzak²

¹Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Wydział Chemii, Instytut Nauk Chemicznych, Katedra Chemii Analitycznej, Pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin; ²Centrum Zaawansowanych Technologii Laserowych, Instytut Fizyki, Bijenička 46, Zagrzeb 10000, Chorwacja;
klaudia.morawska@mail.umcs.pl

Elektrody jonoselektywne to najczęściej stosowane elektrody wskaźnikowe w potencjometrii. W ostatnich latach dużą uwagę skupiają elektrody bez roztworu elektrolitu wewnętrznego tzw. elektrody ze stałym kontaktem, w których funkcje roztworu wewnętrznego spełnia dodatkowy materiał elektroaktywny wprowadzony do konstrukcji elektrody w postaci warstwy pośredniej pomiędzy membraną a materiałem podłoża lub jako składnik polimerowej membrany [1]. Właściwości zastosowanego materiału stałego kontaktu mają istotny wpływ na parametry elektrody przede wszystkim na stabilność i odwracalność potencjału oraz jej żywotność. Parametry te są istotne z praktycznego punktu widzenia gdyż rzutują na dokładność i precyzję oznaczeń. Ostatnie badania wykazały, że w roli stałego kontaktu bardzo dobrze sprawdzają się materiały kompozytowe [2], które pod wieloma względami wykazują korzystniejsze parametry niż ich materiały składowe. W niniejszej pracy zaprezentowano badania dotyczące właściwości i możliwości zastosowania jako stałego kontaktu w elektrodach jonoselektywnych nanocząstek tlenku cynku domieszkowanych nanocząstkami metali szlachetnych tj. platyna, srebro i złoto. Nanocząstki zostały otrzymane metodą impulsowej ablacji laserowej w cieczy, która pozwala na uzyskanie materiałów wysokiej czystości. Następnie scharakteryzowano je za pomocą transmisyjnej mikroskopii elektronowej (TEM), techniki dynamicznego rozpraszania światła (DLS) oraz pomiarów kąta zwilżania. W kolejnym etapie otrzymane materiały zastosowano jako warstwę pośrednią pomiędzy elektrodą wewnętrzną a membraną jonoselektywną czułą na jony azotanowe(V). Wpływ rodzaju nanocząstek na działanie elektrod oceniono na podstawie ich parametrów analitycznych i elektrycznych określonych metodą potencjometryczną oraz elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej. Stwierdzono, że właściwości nanocząstek ZnO domieszkowanych nanocząstkami metalicznymi oraz ich skuteczność jako stałego kontaktu zależą w znacznym stopniu od rodzaju domieszki metalicznej. Dotowanie nanocząstek ZnO metalami zwiększa ich pojemność elektryczną, ale zmniejsza kąt zwilżania. Najlepsze wyniki uzyskano w przypadku elektrody zmodyfikowanej nanocząstkami tlenku cynku domieszkowanymi platyną, charakteryzującymi się największą pojemnością elektryczną, największą hydrofobowością oraz najmniejszymi rozmiarami spośród nanocząstek wzbogacanych. Opracowana elektroda charakteryzowała się bardzo dobrymi parametrami analitycznymi pozwalającymi na jej praktyczne wykorzystanie. Potwierdzono to stosując tę elektrodę do oznaczania stężenia jonów amonowych w próbkach wody gruntowej.

- [1] A. Cadogan, Z. Gao, A. Lewenstam, A. Ivaska, All-solid-state sodium-selective electrode based on a calixarene ionophore in a poly(vinyl chloride) membrane with a polypyrrole solid contact, *Analytical Chemistry* 64 (1992) 2496.
- [2] C. Wardak, K. Pietrzak, K. Morawska, M. Grabarczyk, Ion-selective electrodes with solid contact based on composite materials: A review, *Sensors*, 23 (2023) 5839.



S09 PS03

Charakterystyka elektrochemiczna 4-hydroksyacetofenonu w środowisku kwasu octowego

Agata Skorupa, Sylwia Niechciał, Sławomir Michałkiewicz, Magdalena Jakubczyk

*Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach,
Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Instytut Chemii,
ul. Uniwersytecka 7G, 25-406 Kielce, e-mail: agata.skorupa@ujk.edu.pl*

Coraz częściej tradycyjne środki konserwujące są zastępowane przez naturalne substancje, tzw. alternatywne konserwanty. Do tej grupy należy 4-hydroksyacetofenon (HAP). Wykazuje on szereg właściwości, które są pożądane przez konsumentów. Nie tylko jest antyoksydantem i konserwantem preparatów kosmetycznych, ale także działa przeciwzapalnie i łagodzi podrażnienia skóry. Nadaje jej gładkość i rozjaśnia przebarwienia przyczyniając się do poprawy ogólnego wyglądu. Ponadto zwiększa skuteczność innych składników kosmetyków. Jest substancją bezpieczną i hipoalergiczną, dzięki czemu chodzi w skład różnego rodzaju kremów, żelów, płynów i innych powszechnie stosowanych produktów. Poza branżą kosmetyczną znajduje zastosowanie również w przemyśle spożywczym i farmaceutycznym.

W pracy przedstawiono charakterystykę elektrochemiczną 4-hydroksyacetofenonu (HAP) w środowisku bezwodnego kwasu octowego. Celem było zbadanie mechanizmu anodowego utleniania HAP. Ustalono, że optymalne warunki do badań elektrochemicznych HAP zapewnia rozpuszczalnik mieszany: kwas octowy z dodatkiem acetonitrylu (20%, v/v) zawierający octan sodu (AcNa) jako elektrolit podstawowy. W tym środowisku krzywe rejestrowane techniką woltamperometrii impulsowej różnicowej (DPV) na mikroelektrodzie z włókna węglowego (CF, $\varnothing = 33 \mu\text{m}$) przyjmują kształt symetrycznego piku przy potencjale 1.15 V vs. Ag/AgCl. Z analizy krzywych rejestrowanych techniką woltamperometrii liniowej (LSV) wynika, że proces utleniania HAP jest quasiodwracalny, kontrolowany dyfuzją. Bierze w nim udział jeden elektron oraz jeden proton. Liczbę elektronów potwierdzono w badaniach chronoamperometrycznych (CA) na CF. Dodatkowych informacji na temat produktów reakcji elektrodowej dostarczyły badania przeprowadzone na elektrodzie ze szklanego węgla (GCE, $\varnothing = 2 \text{ mm}$) z zastosowaniem woltamperometrii cyklicznej (CV). Brak piku redukcji wskazywał na to, że są one nieelektroaktywne lub nie redukują się w dostępnym zakresie potencjałów. Analiza porównawcza krzywych DPV dla substancji posiadających takie same grupy funkcyjne jak HAP (fenolu i acetofenonu) wykazała, że w badanym procesie bierze udział grupa hydroksylowa. Potwierdzono to również obliczeniami teoretycznymi z zastosowaniem metody funkcjonału gęstości (DFT), które wskazywały na większą gęstość elektronową na atomie tlenu w grupie $-\text{OH}$.

Otrzymane wyniki badań przeprowadzonych z zastosowaniem elektrod CF oraz GCE pozwoliły na zaproponowanie mechanizmu anodowego utleniania HAP w zastosowanym środowisku. Proces ten przebiega według mechanizmu E_qC_i .

Proces anodowego utleniania 4-hydroksyacetofenonu w środowisku kwasu octowego będzie podstawą opracowania woltamperometrycznej metody jego oznaczania w preparatach kosmetycznych.

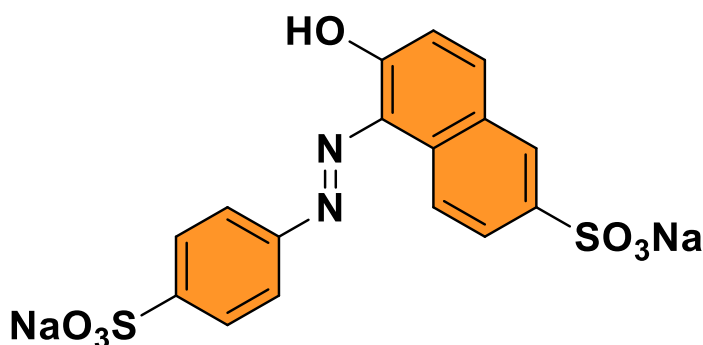
Elektrochemiczne oznaczanie żółcieni pomarańczowej FCF w napoju izotonicznym

Andrzej Krempiński,^{1,2} Aleksandra Grzeszczak,¹ Łukasz Półtorak,¹ Konrad Rudnicki¹

¹Katedra Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki, Tamka 12, 91-403 Łódź

²Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Uniwersytet Łódzki
 konrad.rudnicki@chemia.uni.lodz.pl

Barwniki syntetyczne są powszechnie stosowane w produktach spożywczych i napojach, co stwarza rosnącą potrzebę opracowania wiarygodnych metod analitycznych umożliwiających ich oznaczanie w złożonych matrycach [1]. Jednym z często stosowanych kolorantów jest żółcień pomarańczowa FCF (SY), barwnik azowy powszechnie występujący w napojach bezalkoholowych oraz izotonicznych [2].



Rys. 1. Struktura chemiczna SY.

W niniejszej pracy zbadano elektrochemiczne zachowanie SY na spolaryzowanej granicy fazowej typu ciecz–ciecz (ITIES). Przeanalizowano wpływ środowiska fazy wodnej na odpowiedź SY w szerokim zakresie pH (2–13). Najwyższe wartości prądowe pochodzące od badanego analitu zarejestrowano w środowisku kwasowym. Technikę woltamperometrii cyklicznej (CV) zastosowano do zbadania zależności sygnału SY od jego stężenia oraz szybkości przemiatań potencjałem. Uzyskane krzywe kalibracyjne wykazały dwa zakresy liniowości, co sugeruje zależny od stężenia mechanizm przeniesienia ładunku. Aplikacyjność opracowanej procedury sprawdzono poprzez oznaczenie SY w próbce rzeczywistej (napój izotoniczny) z wykorzystaniem technik: CV oraz woltamperometrii pulsowej-różnicowej (DPV). Ponadto oceniono wpływ 11 potencjalnych substancji interferujących (określonych na podstawie składu napoju izotonicznego) na rejestrowane sygnały pochodzące od oznaczanego analitu. Przedstawione wyniki wskazują, że ITIES stanowi obiecującą platformę do elektroanalitycznego oznaczania barwników spożywczych w złożonych matrycach.

Literatura

- [1] N. Yoshioka, K. Ichihashi, Talanta, 2008, 74, 1408-1413.
 [2] K. Mthiyane, G. E. Uwaya, K. Bisetty, Electroanalysis, 2025, 37, 1-11.

Podziękowania

Badania zrealizowane w ramach grantu OPUS (UMO-2022/45/B/ST4/0218) sfinansowanego przez Narodowe Centrum Nauki w Krakowie.

Ocena właściwości elektrokinetycznych liposomów zawierających kurkuminę w procesie projektowania stabilnych nanosystemów lipidowych

Agnieszka Owerczuk^{1,2}, Joanna Kotyńska², Monika Naumowicz²

¹ Pracownia Bioelektrochemii, Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok

² Szkoła Doktorska, Uniwersytet w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok
monikan@uwb.edu.pl

Projektowanie nowoczesnych systemów dostarczania leków oparte jest na precyzyjnej kontroli właściwości fizykochemicznych zachodzących na granicy faz nanostruktura–środowisko biologiczne. Kluczowym czynnikiem determinującym stabilność koloidalną oraz zdolność do biointerakcji pęcherzyków liposomalnych jest ich ładunek powierzchniowy oraz unikalna struktura podwójnej warstwy elektrycznej. Kurkumina, będąca naturalnym polifenolem o udowodnionym działaniu przeciwnowotworowym, charakteryzuje się niską biodostępnością, stąd konieczność jej enkapsulacji w zoptymalizowanych matrycach lipidowych. W niniejszej pracy skoncentrowano się na elektrochemicznej i elektrokinetycznej ocenie modyfikacji dwuwarstwy lipidowej w celu uzyskania trwałej i powtarzalnej stabilizacji elektrostatycznej projektowanych nanonośników.

Głównym celem podjętych badań było systematyczne monitorowanie zmian potencjału elektrokinetycznego (ζ) oraz kluczowych parametrów hydrodynamicznych liposomów w procesie optymalizacji ich składu jakościowego i ilościowego (wprowadzenie cholesterolu oraz anionowych lipidów powierzchniowych). Równie istotnym aspektem była ocena wpływu enkapsulacji elektroobojętnego ładunku kurkuminy na właściwości elektryczne i stabilność nanonośnika.

Charakterystykę elektrokinetyczną liposomalnych układów zawierających kurkuminę przeprowadzono na podstawie pomiarów ζ metodą elektroforetycznego rozpraszania światła (ELS). Właściwości fizykochemiczne formulacji oceniano z wykorzystaniem dynamicznego rozpraszania światła (DLS), wyznaczając średnicę hydrodynamiczną oraz indeks polidispersyjności. Wydajność enkapsulacji określano po dializie membranowej zwalidowaną metodą spektrofotometryczną.

Badania elektroforetyczne pustych liposomów modyfikowanych cholesterolem (0–40%) wykazały stabilność ładunku powierzchniowego i wzrost heterogeniczności rozmiarowej. Dodatek anionowych fosfolipidów (fosfatydyloglicerolu, PG lub fosfatydyloseryny, PS) ograniczał agregację, a najwyższy ujemny ζ (spełniający kryterium stabilności $|\zeta| \approx 30$ mV) uzyskano przy 50% ich udziale. Uwzględniając elektrostatyczne oddziaływania z ujemnie naładowanymi błonami komórkowymi, jako optymalny wyselekcjonowano układ zawierający 20% lipidów anionowych.

Zaobserwowano, że obecność kurkuminy wpływała na właściwości elektrokinetyczne i fizykochemiczne liposomów SPC, EPC, POPC oraz DMPC. Inkorporacja fitozwiązku w obręb dwuwarstwy lipidowej prowadziła do wzrostu wartości bezwzględnej potencjału elektrokinetycznego oraz obniżenia wskaźnika PDI do około 0,100, co wskazuje na zwiększenie jednorodności i stabilności koloidalnej badanych formulacji. Efektywność enkapsulacji zależała od składu lipidowego układu i osiągała maksymalnie 46% dla formulacji POPC:PG.

Metoda ELS stanowi precyzyjne narzędzie analityczne do monitorowania modyfikacji powierzchniowych w nanosystemach lipidowych. Wykazano, że zarówno dobór składników matrycy, jak i obecność zamkniętego ładunku kurkuminy, determinują właściwości elektrokinetyczne liposomów. Zoptymalizowane pod względem potencjału elektrokinetycznego układy stanowią stabilną platformę do dalszych badań kinetyki uwalniania leku oraz testów *in vitro* z wykorzystaniem modeli komórkowych.



S09 PS06

Stała mikroelektroda bizmutowa jako użyteczne narzędzie w woltamperometrycznej analizie selenu(IV)

Małgorzata Grabarczyk, Marzena Fiałek, Edyta Wlazłowska

*Katedra Chemii Analitycznej, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii UMCS,
pl. Marii Skłodowskiej-Curie 3, 20-031 Lublin;
e-mail: malgorzata.grabarczyk@mail.umcs.pl*

Selen jest pierwiastkiem o istotnym znaczeniu biologicznym i środowiskowym, jednak różne jego formy chemiczne wykazują odmienną biodostępność i toksyczność, co sprawia, że specjacyjna analiza selenu stanowi ważne zagadnienie analityczne. Najbardziej toksycznym i biodostępnym z nieorganicznych związków selenu jest Se(IV). Woltamperometria strippingowa należy do grupy technik umożliwiających oznaczanie śladowych stężeń Se(IV), przy czym dotychczas najczęściej wykorzystywano elektrody rtęciowe. Ze względu na toksyczność rtęci poszukiwane są jednak bardziej przyjazne dla środowiska materiały elektrodowe. W niniejszej pracy zaproponowano zastosowanie stałej mikroelektrody bizmutowej do oznaczania Se(IV) metodą woltamperometrii strippingowej. Elektroda została wykonana z wykorzystaniem szklanej kapilary o średnicy 25 μm wypełnionej bizmutem i umieszczonej w obudowie wykonanej z PEEK. Opracowane rozwiązanie stanowi ekologiczną alternatywę nie tylko dla elektrod rtęciowych, lecz również dla filmowych elektrod bizmutowych formowanych in situ lub ex situ. W przeciwieństwie do tych ostatnich nie wymagany jest dodatek jonów Bi(III) do roztworu pomiarowego w celu utworzenia filmu bizmutowego, co ogranicza zużycie odczynników i ilość generowanych odpadów. Dodatkowo stała mikroelektroda bizmutowa charakteryzuje się długoterminową stabilnością, jak wykazano po sześciu miesiącach użytkowania mikroelektroda nadal utrzymuje stabilność sygnału w granicach $\pm 5\%$.

Celem badań była ocena przydatności stałej mikroelektrody bizmutowej w oznaczaniu selenu(IV) metodą woltamperometrii strippingowej. Przeprowadzono optymalizację parametrów pomiarowych, obejmujących skład elektrolitu podstawowego, potencjał i czas zatężania oraz parametry rejestracji sygnału. Uzyskana granica wykrywalności 0.5 nmol/L wraz ze względnym odchyleniem standardowym 4.2% potwierdziła, że stała mikroelektroda bizmutowa umożliwia skuteczne oznaczanie śladowych ilości selenu(IV) zapewniając dobrą powtarzalność i wysoką czułość oznaczeń. Opracowana procedura została z sukcesem zastosowana do analizy wód środowiskowych potwierdzając, że mikroelektroda bizmutowa stanowi wartościowe narzędzie do rutynowej analizy próbek środowiskowych.



S09 PS07

Zastosowanie zespołu 800 mikroelektrod złotych do szybkiego woltamperometrycznego monitoringu wód środowiskowych pod kątem zawartości azotynów

Małgorzata Grabarczyk, Marzena Fiałek

*Katedra Chemii Analitycznej, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii UMCS,
pl. Marii Skłodowskiej-Curie 3, 20-031 Lublin;
e-mail: malgorzata.grabarczyk@mail.umcs.pl*

Azotyny to nietrwałe i wysoce reaktywne związki azotu. W środowisku i organizmie człowieka powstają naturalnie w wyniku przemian cyklu azotowego (utlenianie amoniaku lub redukcja azotanów), lecz ich nadmiar jest w głównej mierze wynikiem intensywnej działalności człowieka, głównie rolnictwa oraz przemysłu spożywczego. Azotyny należą do związków azotowych dodawanych jako konserwanty do żywności w celu zapobiegania jej psuciu i namnażania się niebezpiecznych dla zdrowia bakterii, co wydłuża okres jej przydatności do spożycia. W przypadku rolnictwa głównym źródłem azotynów jest nawożenie gleb. Choć nawozy dostarczają głównie azotanów i amoniaku, w procesie obiegu azotu przekształcają się częściowo w azotyny, które wpływając do wód stanowią poważne zagrożenie środowiskowe co prowadzi do degradacji lokalnych ekosystemów wodnych. Wobec tego niezbędne staje się oznaczanie azotynów na poziomie śladowym zarówno w żywności jak i próbkach wód środowiskowych.

W praktyce wykorzystywane są różne techniki oznaczania azotynów, wśród nich znajduje się między innymi chromatografia, spektrofotometria, chemiluminescencja, elektroforeza kapilarna czy też woltamperometria, która jest stosunkowo prosta, szybka i niedroga, a zarazem dokładna. W naszych badaniach do monitoringu wód środowiskowych wykorzystaliśmy technikę woltamperometrii z użyciem nowo opracowanego czujnika elektrochemicznego, który stanowi zespół 800 mikroelektrod złotych o średnicy $0.35\ \mu\text{m}$. W czujniku tym każda zastosowana mikroelektroda złota działa indywidualnie i przyczynia się do całkowitego zmierzonego prądu w układach mikroelektrod, dzięki czemu zarejestrowany prąd jest wzmocniony i mniej wrażliwy na zakłócenia. Granica wykrywalności azotynów za pomocą proponowanej mikroelektrody zespolonej jest niższa od dopuszczalnej normy i wynosi $0,6\ \mu\text{mol/L}$. Dodatkową zaletą opracowanej procedury jest niewrażliwość analitycznego sygnału na obecność substancji powierzchniowo czynnych i humusowych a zatem próbki wody, nawet o złożonej matrycy organicznej, mogą być bezpośrednio analizowane, bez konieczności ich obróbki przed pomiarem [1].

Literatura:

Fiałek M., Grabarczyk M., *Journal of the Electrochemical Society* 171 (2024) 117517.



S09 PS08

Elektroda jonoselektywna SC-ISE czuła na kation chlorheksydyny

Joanna Lenik, Cecylia Wardak, Katarzyna Witkowska

*Katedra Chemii Analitycznej, Wydział Chemii, Instytut Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej,
pl. M. Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin;
joanna.lenik@mail.umcs.pl*

Celem niniejszych badań było opracowanie czujnika potencjometrycznego o dobrych parametrach analitycznych do oznaczania chlorheksydyny (CHD). Wg klasyfikacji chemicznej chlorheksydyna należy do pochodnych guanidyny i jest uważana za jeden z najbardziej skutecznych środków zwalczających drobnoustroje. Znajduje zastosowanie w preparatach do dezynfekcji, do mycia pola operacyjnego i jest bezpiecznym środkiem przeciwbakteryjnym stosowanym również w stomatologii.

W kontroli jakości leków, w badaniach zawartości substancji aktywnych dominującą rolę spełniają metody farmakopealne głównie metody chromatografii, spektroskopii czy metody miareczkowe. Potencjometria z wykorzystaniem jonoselektywnych elektrod jest metodą, którą również stosuje się (w badaniach naukowych) do analizy ilościowej substancji leczniczych. Do mocnych zalet takich czujników należą: niskie koszty wytwarzania oraz stosunkowo niedroga aparatura pomiarowa, bezpośredni pomiar w niemodyfikowanej próbce co znacznie obniża również koszty związane z analizą. Ponadto elektrody są łatwe w przygotowaniu i obsłudze, wykazują wystarczającą selektywność, zakres pomiarowy do analitycznego ich wykorzystania. Problemem, który często występuje i ogranicza ich zastosowanie jest niestabilny potencjał, który powoduje błędy w analizie. Dlatego wyzwaniem w badaniach nad elektrodami jonoselektywnymi jest dążenie do optymalizacji ich parametrów, uzyskanie powtarzalnego, odwracalnego potencjału, poprzez wykorzystanie nowych konstrukcji, materiałów czy związków receptorowych membrany.

W pracy przedstawiono wyniki badań opracowania elektrody jonoselektywnej SC-ISE (*Single-Piece Ion Selective Electrode*) na bazie węgla szklatego ze stałym kontaktem i polimerową membraną (GC/MWCNT/membrana). Jako porównawczą elektrodę jonoselektywną badano czujnik o takim samym składzie membrany bez warstwy mediacyjnej. Spreparowane membrany elektrod zawierały w swoim składzie wymiennicz jonowy/jonofor - KTpClBP+HSB β CD, plastifikator o-NPOE oraz PVC. Wyznaczono podstawowe parametry analityczne badanych czujników tj. nachylenie prostoliniowej części krzywej odpowiedzi, granicę wykrywalności, czas odpowiedzi, odwracalność potencjału, dryft potencjału, czas życia. Uzyskana elektroda ze stałym kontaktem charakteryzuje się teoretycznym nachyleniem krzywej odpowiedzi $29,5 \pm 4,3$ mV/dekadę w zakresie stężenia CHD 10^{-6} - 10^{-3} mol/L, $R^2 = 0,9991 \pm 0,0009$, granicą wykrywalności $7,9 \cdot 10^{-7}$ mol/L. Elektroda posiada krótki czas odpowiedzi 10 s, w roztworze 10^{-5} mol/L przy ok siedmiokrotnej nagłej zmianie stężenia. Potencjał elektrody charakteryzuje się dobrą odwracalnością, w roztworze np. o stężeniu 10^{-4} mol/L odchylenie standardowe wynosi 0,25 mV. Dryft potencjału elektrody w roztworze o stężeniu 10^{-4} mol/L wynosi w skali krótko-czasowej (120 min) jak i długo-czasowej (240 min) 0,1 – 0,09 mV/min. Sprawdzono również selektywność względem wybranych jonów jonów oraz innych substancji pomocniczych występujących w preparatach farmaceutycznych. Największą interferencję wykazują jony potasu pochodzące od acesulfamu oraz chlorku, następnie jony wapnia, magnezu i sodu.

Opracowana elektroda jonoselektywna posiadają korzystne parametry analityczne pozwalające na jej zastosowanie analityczne do oznaczania chlorheksydyny w preparatach farmaceutycznych.



S09 PS09

Odpady bateryjne jako efektywne elektrokatalizatory w reakcji wydzielania tlenu

Magdalena Warczak¹, Katarzyna Belka¹, Weronika Urbańska², Monika Michalska³, Njemuwa Nwaji⁴, Magdalena Osiał⁴

¹ Politechnika Bydgoska, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz

² Politechnika Wrocławska, Wydział Inżynierii Środowiska, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław

³ Faculty of Materials Science and Technology, Department of Chemistry and Physico-Chemical Processes, VSB-Technical University of Ostrava, 17. listopadu 2172/15, Ostrava-Poruba, 708 00, Czech Republic

⁴ Instytut Podstawowych Problemów Techniki, Zakład Teorii Ośrodków Ciągłych i Nanostruktur, ul. Pawińskiego 5B, 02-106 Warszawa

e-mail: magdalena.warczak@pbs.edu.pl

Elektrokatalityczny rozkład wody morskiej jest obecnie jedną z najbardziej obiecujących metod produkcji czystego wodoru. Kluczowym elementem tego procesu jest zastosowanie ekonomicznych elektrokatalizatorów, które zwiększają jego wydajność i opłacalność. W odpowiedzi na te potrzeby zaproponowano nowe wykorzystanie czarnej masy węglowej, pozostałej po hydrometalurgicznym odzysku metali, jako efektywnego i stabilnego elektrokatalizatora reakcji wydzielania tlenu (OER) w środowisku zasadowym. Analizy fizykochemiczne wykazały, że skład i struktura czarnej masy węglowej po ługowaniu zużytych baterii litowo-jonowych zależą od warunków recyklingu, co bezpośrednio wpływa na jej aktywność elektrokatalityczną w procesie OER. Odpady bateryjne ługowane kwasem siarkowym zawierały więcej związków kobaltu (głównie LiCoO_2 i Co_3O_4) osadzonych w porowatej matrycy węglowej, co przekładało się na najlepsze właściwości katalityczne. Wynikało to z połączenia faz zawierających kobalt z dobrze rozwiniętą, porowatą strukturą węglową, która zapewnia dużą powierzchnię czynną elektrochemicznie. Badania elektrochemiczne potwierdziły, że odpady ze zużytych baterii litowo-jonowych wykazują wysoką aktywność katalityczną w procesie OER, osiągając gęstość prądu 10 mA cm^{-2} przy nadpotencjale 226 mV (dla rozkładu wody) i 225 mV (dla rozkładu wody morskiej). Te wartości są wyższe tylko o 14 mV i 95 mV w porównaniu z komercyjnym katalizatorem RuO_2 [1].

Literatura

[1] Warczak, M., Belka, K., Urbańska, W. *et al.* Lithium-ion battery waste as a robust oxygen evolution reaction electrocatalyst for seawater splitting. *Sci Rep* **16**, 4688 (2026).

Podziękowania:

Badania zrealizowane w ramach grantu SONATA nr 2022/47/D/ST4/01421 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki.



S09 PS10

Stała mikroelektroda bizmutowa do oznaczania śladowych ilości wanadu(V) w próbkach środowiskowych

Edyta Sobczak, Małgorzata Grabarczyk

Katedra Chemii Analitycznej, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie
edyta.sobczak@mail.umcs.pl

Bezpieczna woda pitna stanowi podstawę zdrowia publicznego, dlatego monitorowanie jej jakości jest jednym z najważniejszych elementów ochrony środowiska. Wanad jest pierwiastkiem powszechnie występującym w środowisku naturalnym zarówno ze źródeł geogenicznych, jak i antropogenicznych. Do środowiska przedostaje się głównie w wyniku spalania paliw kopalnych oraz działalności przemysłowej. Mimo że w śladowych ilościach pełni określone funkcje biologiczne, jego związki wykazują wysoką toksyczność, a jedną z głównych dróg narażenia człowieka jest spożywanie zanieczyszczonej wody. Z tego względu opracowywanie czułych, selektywnych i przyjaznych środowisku metod oznaczania śladowych ilości wanadu(V) ma istotne znaczenie analityczne i środowiskowe [1].

Celem pracy było opracowanie procedury oznaczania jonów wanadu(V) metodą adsorpcyjnej woltamperometrii stripingowej (AdSV) z wykorzystaniem stałej mikroelektrody bizmutowej. Zastosowanie mikroelektrody umożliwia ograniczenie wpływu prądów pojemnościowych, poprawę stosunku sygnału do szumu oraz zwiększenie czułości oznaczeń. Stała mikroelektroda bizmutowa stanowi ekologiczną alternatywę dla klasycznych elektrod rtęciowych, eliminując konieczność stosowania rtęci oraz dodatku jonów bizmutu do roztworu pomiarowego.

Po optymalizacji warunków pomiarowych uzyskano liniowy zakres oznaczalności wanadu(V) od 8×10^{-10} do 1×10^{-7} mol L⁻¹ przy czasie nagromadzenia wynoszącym 60 s. Granica wykrywalności metody wyniosła $2,5 \times 10^{-10}$ mol L⁻¹, natomiast granica oznaczalności $8,3 \times 10^{-10}$ mol L⁻¹. Opracowana procedura charakteryzowała się dobrą powtarzalnością oraz odtwarzalnością. Dokładność metody zweryfikowano z wykorzystaniem certyfikowanego materiału odniesienia SPS-WW1, uzyskując wynik $95,1 \pm 1,6$ ng mL⁻¹ przy wartości certyfikowanej $100,0 \pm 0,5$ ng mL⁻¹. Przydatność procedury potwierdzono również podczas oznaczania wanadu(V) w próbkach wody rzecznej, wodociągowej oraz deszczowej, uzyskując odzyski w zakresie 96-106%.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że opracowana procedura z wykorzystaniem stałej mikroelektrody bizmutowej umożliwia czułe, dokładne i selektywne oznaczanie śladowych ilości wanadu(V) w próbkach środowiskowych. Zastosowanie bezrtęciowej elektrody pracującej oraz korzystne parametry analityczne wskazują na potencjał metody do rutynowej analizy próbek środowiskowych zgodnie z zasadami zielonej chemii analitycznej [2].

Ref.

- [1] Y. Vasseghian, S. Sadeghi Rad, J.A. Vilas-Boas, A. Khataee, *Chemosphere* 267, 128904, 2021.
- [2] M. Grabarczyk, M. Adamczyk, E. Wlazłowska, *Molecules* 27, 2168, 2022.



S09 PS11

Bezrtęciowy czujnik elektrochemiczny do oznaczania śladowych ilości wolframu(VI) metodą katodowej woltamperometrii stripingowej

Edyta Sobczak, Małgorzata Grabarczyk

Katedra Chemii Analitycznej, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie
edyta.sobczak@mail.umcs.pl

Elektrody rtęciowe przez wiele lat stanowiły podstawowe czujniki wykorzystywane do oznaczania śladowych ilości metali metodami woltamperometrii stripingowej ze względu na ich wysoką czułość i korzystne właściwości elektrochemiczne. Jednak toksyczność rtęci, ryzyko zanieczyszczenia środowiska oraz coraz bardziej restrykcyjne przepisy dotyczące jej stosowania spowodowały intensywny rozwój bezrtęciowych materiałów elektrodowych. Obecnie poszukiwane są nowe materiały, które zachowują wysoką czułość metod elektrochemicznych, a jednocześnie są bezpieczne dla użytkownika i środowiska [1]. Wśród obiecujących materiałów znajdują się wielościennie nanorurki węglowe (MWCNT), charakteryzujące się dużą powierzchnią właściwą, wysoką przewodnością elektryczną oraz stabilnością chemiczną [2]. Połączenie MWCNT ze sferycznym węglem szklistym (SGC) umożliwia otrzymanie kompozytu o rozwiniętej powierzchni elektroaktywnej i korzystnych właściwościach mechanicznych, sprzyjających efektywnemu nagromadzeniu analitu oraz zwiększeniu czułości oznaczeń elektrochemicznych.

Wolfram ze względu na swoje właściwości jest szeroko stosowany w różnych gałęziach przemysłu, w tym w elektronice, technologii lotniczej i kosmicznej oraz do produkcji specjalistycznych stopów. Jego naturalne stężenie w glebie i wodzie jest zazwyczaj niskie, ale intensyfikacja jego przemysłowego wykorzystania prowadzi do zwiększenia jego obecności w środowisku, co czyni go nowym i znaczącym zanieczyszczeniem środowiska. W niniejszym badaniu przedstawiono zastosowanie nowej elektrody skonstruowanej z MWCNT i SGC modyfikowanej in situ warstwą ołowiu do oznaczania wolframu(VI) metodą katodowej woltamperometrii stripingowej. Strategia modyfikacji opiera się na wcześniejszych doniesieniach wykazujących ulepszoną wydajność analityczną elektrod węglowych pokrytych warstwą ołowiu. Warunki eksperymentalne zostały zoptymalizowane, w tym rodzaj i stężenie elektrolitu podstawowego, stężenie Pb(II) oraz parametry pomiaru. Opracowana procedura umożliwiła oznaczanie wolframu(VI) w zakresie stężeń od 7×10^{-10} do 7×10^{-7} mol L⁻¹. Granica wykrywalności wyniosła 3×10^{-10} mol L⁻¹. Metoda wykazała wysoką selektywność wobec większości badanych jonów nieorganicznych oraz dobrą odporność na efekty matrycowe. Jej przydatność potwierdzono podczas oznaczania wolframu(VI) w próbkach wody wodociągowej, rzecznej oraz certyfikowanych materiałach odniesienia, uzyskując odzyski w zakresie 96,0-104,1%. Uzyskane wyniki potwierdzają, że opracowana elektroda MWCNT/SGC modyfikowana in situ warstwą ołowiu stanowi skuteczne narzędzie do oznaczania śladowych ilości wolframu(VI). Zastosowanie nanomateriałów węglowych umożliwiło uzyskanie wysokiej czułości, dobrej powtarzalności, czyniąc opracowaną metodę atrakcyjną alternatywą dla klasycznych elektrod rtęciowych [2].

Ref.

- [1] M. Motshakeri, B. Angoro, A.R.J. Phillips, D. Svirskis, P.A. Kilmartin, M. Sharma, *Sensors* 25, 1474, 2025.
- [2] M. Grabarczyk, E. Wlazłowska, *Materials* 19, 1202, 2026



S10

Sekcja Młodych





Wykłady sekcyjne



S10 WS01

W świecie ciekłych antybiotyków: czyli krótka opowieść o chemii, biologii i materiałach oraz o myśleniu poza granicami dyscyplin

Tomasz Swebocki

Politechnika Gdańska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, 80-233, Gdańsk;

Politechnika Gdańska, Centrum Materiałów Przyszłości, 80-233, Gdańsk;

tomasz.swebocki@pg.edu.pl

Czy era wielkich, fundamentalnych odkryć jest już za nami? A może przeciwnie – w czasach bezprecedensowego przyrostu informacji najciekawsze odkrycia powstają właśnie tam, gdzie przestają obowiązywać tradycyjne granice między dyscyplinami?

Współczesna nauka coraz częściej mierzy się z problemami, których nie da się rozwiązać w ramach jednej specjalności. Ochrona zdrowia, narastająca oporność drobnoustrojów czy projektowanie nowych biomateriałów wymagają łączenia perspektyw chemii, biologii, mikrobiologii i inżynierii materiałowej. Interdyscyplinarność staje się tym samym nie tylko sposobem organizacji badań, lecz również narzędziem pozwalającym formułować nowe pytania i poszukiwać nieoczywistych rozwiązań.

Celem wykładu będzie pokazanie interdyscyplinarności z dwóch uzupełniających się perspektyw: jako elementu rozwoju naukowego oraz jako praktycznego podejścia do rozwiązywania współczesnych problemów badawczych.

Pierwsza część zostanie poświęcona osobistej drodze naukowej prowadzącej od chemii, przez mikrobiologię, do inżynierii biomateriałowej. Na jej przykładzie przedstawione zostanie znaczenie przekraczania granic własnej specjalizacji, zdobywania kompetencji z różnych obszarów oraz wykorzystywania wcześniejszych doświadczeń w nowych kontekstach badawczych.

Druga, zasadnicza część wykładu będzie dotyczyła poszukiwania nowych strategii przeciwdrobnoustrojowych w odpowiedzi na rosnącą zdolność bakterii do adaptacji i rozwijania oporności na antybiotyki. Szczególna uwaga zostanie poświęcona rozpuszczalnikom głęboko eutektycznym (deep eutectic solvents, DESs) – układom tworzonym przez odpowiednio dobrane donory i akceptory wiązań wodorowych. Przedstawione zostaną wyniki badań nad ich aktywnością przeciwbakteryjną wobec bakterii Gram-dodatnich i Gram-ujemnych, w tym szczepów opornych na antybiotyki¹, a następnie nad możliwością wykorzystania DES-ów jako funkcjonalnych składników biomateriałów². Na przykładzie hydrożeli żelatynowych omówione zostanie, w jaki sposób obecność DES-ów może wpływać na strukturę materiału, jego właściwości przeciwbakteryjne oraz retencję i transport cząsteczek, w tym antybiotyków. Powstające w ten sposób eutektogeły mogą łączyć funkcję materiałową, transportową i biologiczną, tworząc podstawę do projektowania nowych systemów kontrolowanego dostarczania leków, między innymi w obszarze leczenia ran.

Wykład będzie więc próbą pokazania, że interdyscyplinarność może być rozumiana zarówno jako cecha współczesnej nauki, jak i jako sposób jej uprawiania – oparty na łączeniu metod, języków i doświadczeń pochodzących z różnych dziedzin.

¹Swebocki, et al. *Advanced Functional Materials*, 2026, 36(41), e74765

²Swebocki, et al. *Advanced Healthcare Materials*, 2024, 13(14), 2303475



Komunikaty sekcyjne



S10 KS01

Fluorochinolonowe ciecze jonowe jako nowa klasa związków przeciwdrobnoustrojowych

Mateusz Jasica, Katarzyna Malarz^b, Ondřej Jand'ourek^c, Klára Konečná^c, M. Doležal^c, Robert Musioł^a, Wioleta Cieślik^a

Afiliacja;

^a *Instytut Chemii, Uniwersytet Śląski w Katowicach, ul. 75 Pułku Piechoty 1a, 41-500 Chorzów, Polska*

^b *Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski w Katowicach, ul. 75 Pułku Piechoty 1a, 41-500 Chorzów, Polska*

^c *Wydział Farmaceutyczny Uniwersytetu Karola w Hradcu Králové, Heyrovského 1203, 500 05 Hradec Králové, Czechy*

adres korespondencyjny;

e-mail: mateusz.jasica.us@gmail.com

Rosnąca na świecie oporność na środki przeciwdrobnoustrojowe wymaga opracowania strategii wykraczających poza tradycyjne poszukiwanie nowych antybiotyków. Jednym z obiecujących podejść jest przekształcanie farmaceutycznych substancji czynnych w ciecze jonowe (API-ILs), co umożliwia modyfikację ich właściwości fizykochemicznych i biologicznych.

W pracy przedstawiono projektowanie i syntezę biblioteki cieczy jonowych oraz soli organicznych opartych na fluorochinolonach. Związki otrzymano metodami wymiany jonowej, łącząc aniony fluorochinolonowe ze zróżnicowanymi kationami organicznymi. Modułowy charakter tej metody umożliwia regulowanie właściwości układów poprzez odpowiedni dobór przeciwjonu. Strukturę, czystość i stabilność otrzymanych związków potwierdzono za pomocą spektroskopii NMR i IR, spektrometrii mas oraz analizy termogravimetrycznej.

Otrzymane pochodne wykazywały znacznie większą rozpuszczalność w wodzie niż antybiotyki macierzyste, co potwierdza możliwość wykorzystania API-ILs jako postaci leków o zwiększonej rozpuszczalności. Stopień poprawy zależał od budowy kationu, wskazując na znaczenie tworzenia par jonowych jako narzędzia projektowania w chemii medycznej.

Aktywność biologiczną oceniono wobec klinicznie istotnych bakterii Gram-dodatnich i Gram-ujemnych, w tym szczepów lekoopornych, MRSA oraz wybranych gatunków rodzaju *Mycobacterium*. Wykazano zależność struktura–aktywność determinowaną zarówno przez rdzeń fluorochinolonowy, jak i przeciwjon. Wybrane pochodne charakteryzowały się większą aktywnością przeciwbakteryjną niż leki macierzyste, podczas gdy pozostałe zachowywały porównywalną skuteczność. Badania cytotoksyczności na prawidłowych ludzkich fibroblastach skóry właściwej (NHDF) dodatkowo wskazały na potencjał terapeutyczny tych układów.

Uzyskane wyniki pokazują, że fluorochinolonowe ciecze jonowe stanowią wszechstronną platformę do opracowywania środków przeciwdrobnoustrojowych nowej generacji. Dalsze badania będą obejmowały rozszerzenie biblioteki związków, ocenę aktywności przeciwbiofilmowej oraz analizę zależności struktura–właściwości–aktywność, ukierunkowaną na zwalczanie uporczywych zakażeń i szczepów opornych na leczenie.

Praca finansowana przez Narodowe Centrum Nauki (NCN), Polska SONATA 20, projekt nr 2024/55/D/NZ7/02182 „Fluorochinolonowe ciecze jonowe nowej generacji: skuteczne środki antybiofilmowe”



S10 KS02

Właściwości fizykochemiczne i aktywność przeciwbakteryjna nanocząstek srebra stabilizowanych w układach chitozan-żelatyna

Julia Bielicka¹, Karolina Rojek¹, Szymon Mania², Tomasz Swebocki¹

¹Politechnika Gdańska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Instytut Inżynierii Materiałowej i Nanotechnologii, G. Narutowicza 11/12, 80-233, Gdańsk, Polska

²Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, G. Narutowicza 11/12, 80-233, Gdańsk, Polska
s204358@student.pg.edu.pl

Nanocząstki srebra (AgNPs) ze względu na swoje unikalne właściwości fizykochemiczne oraz szerokie spektrum aktywności biologicznej należą do najintensywniej badanych nanomateriałów. Szczególne zainteresowanie budzi ich potencjał w zastosowaniach biomedycznych, obejmujących materiały przeciwdrobnoustrojowe, opatrunki wspomagające gojenie ran, systemy dostarczania leków, a także nowoczesne rozwiązania diagnostyczne i terapeutyczne [1]. Skuteczność i bezpieczeństwo układów zawierających AgNPs są jednak ściśle związane z parametrami takimi jak wielkość cząstek, stabilność koloidalna oraz właściwości powierzchniowe, które mogą być modyfikowane przez dobór odpowiednich czynników stabilizujących. W tym kontekście szczególne znaczenie zyskują biopolimery, takie jak chitozan i żelatyna, które nie tylko poprawiają stabilność nanocząstek, ale również zwiększają biokompatybilność układu i mogą wspierać jego aktywność biologiczną [2].

W ramach pracy przeprowadzono syntezę AgNPs redukowanych borowodorkiem sodu (NaBH_4) i stabilizowanych w układach chitozanowo-żelatynowych. Otrzymane nanocząstki poddano kompleksowej charakterystyce fizykochemicznej obejmującej analizę widm UV-Vis, pomiary średnicy hydrodynamicznej i rozkładu wielkości cząstek metodą dynamicznego rozpraszania światła (DLS), oznaczenie potencjału zeta oraz obserwację morfologii z wykorzystaniem skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM). Dodatkowo oceniono właściwości użytkowe materiałów poprzez badania reologiczne, pomiary kątów zwilżania oraz analizę kinetyki uwalniania AgNPs z matryc żelatynowych. Aktywność przeciwbakteryjną badanych układów oceniono wobec szczepów modelowych *Escherichia coli* oraz opornego na metycylinę *Staphylococcus aureus* (MRSA). Wyznaczono wartości minimalnego stężenia hamującego i bakteriobójczego (MIC/MBC), a także przeprowadzono testy kinetyki zabijania (TKA) dla wolnych nanocząstek oraz układów zawierających matryce żelatynowe.

Uzyskane wyniki wskazują, że zastosowanie układów chitozan-żelatyna umożliwia otrzymanie stabilnych nanocząstek srebra o korzystnych właściwościach fizykochemicznych oraz o wysokiej aktywności przeciwbakteryjnej zarówno wobec bakterii Gram-dodatnich, jak i Gram-ujemnych. Otrzymane materiały stanowią obiecującą platformę do projektowania funkcjonalnych biomateriałów o kontrolowanych właściwościach powierzchniowych i przeciwdrobnoustrojowych.

1. Gherasim O., et al., 2020, An Updated Review on Silver Nanoparticles in Biomedicine, *Nanomaterials*, 10, 2318
2. Kumar S.S.D., et al., 2018, Recent advances on silver nanoparticle and biopolymer-based biomaterials for wound healing application, *International Journal of Biological Macromolecules*, 115, 165-175

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu

MINIATURA 9 (2025/09/X/ST11/00066)

oraz współfinansowane przez Politechnikę Gdańską ze środków programu IDUB w ramach programu NOBELIUM (5/1/2024/IDUB/I.1a/No).

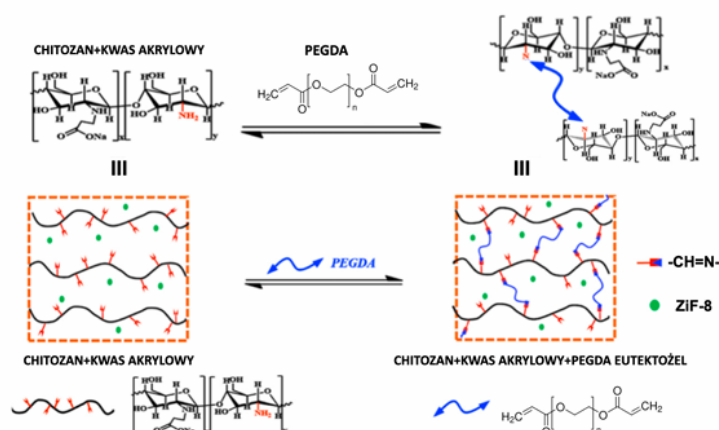
Hybrydowe eutektozele oparte na rozpuszczalnikach głęboko eutektycznych jako inteligentne materiały opatrunkowe

Aleksandra Sikora¹, Marcin Wysokowski², Anna Zachwieja¹, Adam Gorczyński¹

¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii; ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań

²Wydział Technologii Chemicznej Politechniki Poznańskiej, Ul. Berdychowo 4, 61-131 Poznań
aleksandra.sikora@amu.edu.pl

Przewlekłe i trudno gojące się rany stanowią istotny problem współczesnej medycyny, stwarzając potrzebę opracowania nowych materiałów opatrunkowych o zwiększonej funkcjonalności. Jedną z obiecujących grup materiałów są eutektozele bazujące na rozpuszczalnikach głęboko eutektycznych (DES)[1], które dzięki swoim właściwościom mogą znaleźć zastosowanie w biomedycynie oraz systemach kontrolowanego uwalniania substancji aktywnych [2].



Rysunek 1: Schematyczne powstawanie eutektożelu polimerowego [3]

W ramach badań opracowano hybrydowe eutektozele zawierające struktury metaloorganiczne ZIF-8 [3] oraz polioksometalany (POM) [4]. Przeprowadzono optymalizację składu matrycy żelowej, dobór komponentów sieciujących oraz analizę wpływu poszczególnych składników na proces żelowania i właściwości końcowe materiałów. Otrzymane układy scharakteryzowano z wykorzystaniem metod spektroskopowych oraz badań reologicznych, oceniając ich stabilność strukturalną i właściwości mechaniczne. Uzyskane wyniki potwierdziły możliwość otrzymania stabilnych materiałów hybrydowych o potencjalnych właściwościach przeciwbakteryjnych i wysokim potencjale aplikacyjnym. Opracowane eutektozele mogą stanowić interesującą platformę do projektowania nowoczesnych, inteligentnych opatrunków wspomagających proces gojenia ran.

Literatura:

- [1] Omar, K. A.; *Journal of Molecular Liquids*, 2022, 119524.
- [2] Khan, S. B.; *Molecules* 2021, 26, (13), 3995.
- [3] Qu, J.; *Acta Biomaterialia*, 2017, 58, 168.
- [4] Pakulski, D.; *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62(32), e202305239.

Podziękowania dla Grantu NCN Sonata-Bis numer 2025/58/E/ST5/00124



S10 KS04

Enkapsulacja 5-fluorouracylu w cholesterylowej pochodnej β -cyklodekstryny: od syntezy i modelowania do aktywności przeciwnowotworowej

Bartosz Maliszewski^{1,2}, Paweł Misiak¹, Beata Skonieczna³, Joanna Wołosewicz¹, Katarzyna Niemirowicz-Laskowska³, Halina Car³, Anna Ignaczak⁴, Agnieszka Z. Wilczewska¹

¹Zakład Polimerów i Syntezy Organicznej, Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok

²Szkoła Doktorska Uniwersytetu w Białymstoku, ul. Ciołkowskiego 1K, 15-245 Białystok

³Zakład Farmakologii Doświadczalnej, Wydział Nauk o Zdrowiu, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku, ul. Szpitalna 37, 15-295 Białystok

⁴Katedra Chemii Fizycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Łódzki, ul. Pomorska 163/165, 90-236 Łódź; b.maliszewski@uwb.edu.pl

Rak jelita grubego (CRC) jest drugą najczęstszą przyczyną zgonów z powodu chorób nowotworowych.¹ Standardowo stosowany 5-fluorouracyl (5-FU) wykazuje liczne ograniczenia, takie jak krótki okres półtrwania, niska selektywność oraz narastająca oporność komórek nowotworowych.² Jedną ze strategii ograniczania działań niepożądanych 5-FU jest zastosowanie systemów dostarczania. β -cyklodekstryna (β -CD) wykazuje korzystne właściwości nośnikowe dzięki strukturze torusa umożliwiającej tworzenie kompleksów inkluzyjnych typu „gość-gospodarz”.

Celem pracy było opracowanie nośnika – β -cyklodekstryny zmodyfikowanej 21 grupami cholesterylowymi (CD21chol), wykazującego właściwości kompleksujące oraz zdolność do tworzenia tratw lipidowych, co może zwiększać efektywność transportu leku do wnętrza komórek. Synteza CD21chol obejmowała funkcjonalizację cholesterolu do bursztynianu monocholesterylu (CHEMS), a następnie estryfikację poprzez chlorek kwasowy grup hydroksylowych cyklodekstryny. W kolejnym etapie otrzymano kompleksy CD21chol z 5-FU. Zdolność CD21chol do tworzenia kompleksów z 5-FU oceniono przy użyciu spektroskopii w podczerwieni z transformacją Fouriera (ATR-FTIR) oraz metod analizy termicznej: analizy termogravimetrycznej (TGA) i skaningowej kalorymetrii różnicowej (DSC). Technikami dynamicznego i elektroforetycznego rozpraszania światła (DLS i ELS) wyznaczono wielkość cząstek i ich stabilność koloidalną.³

Dodatkowo przeprowadzono badania metodami chemii obliczeniowej. Na podstawie wyników *in silico* i analiz fizykochemicznych ustalono pojemność enkapsulacji CD21chol – 3 cząsteczki 5-FU. Najsilniejszy efekt cytotoksyczny wykazał układ 1:3, istotnie obniżając przeżywalność komórek DLD-1. Mechanizm działania obejmował destabilizację integralności błony komórkowej oraz aktywację wewnątrz- i zewnątrzpo pochodnego szlaku apoptozy. Jednocześnie nośnik CD21chol wykazał ograniczoną toksyczność wobec komórek prawidłowych. Modyfikowana ugrupowaniami cholesterylowymi β -CD znacząco poprawia indeks terapeutyczny 5-FU. Kompleks CD21chol:5-FU w stosunku 1:3 stanowi obiecujący system dostarczania leków w celowanej terapii CRC.

Projekt finansowany przez NCN, grant Preludium 19 nr 2020/37/N/ST5/02140. Analizy wykonano w Centrum Syntezy i Analizy BioNanoTechno Uniwersytetu w Białymstoku. Wypożyczenie Centrum zakupiono z funduszy Unii Europejskiej na lata 2007-2013; projekt POPW.01.03.00-20-034/09-00 oraz POPW.01.03.00-20-004/11. Badania biologiczne finansowane przez UMB (B.SUB.25.215 HC, B.SUB.25.257 KNL). Obliczenia DFT wykonano przy użyciu zasobów udostępnionych przez Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe (<https://wcss.pl>), grant obliczeniowy Nr 443.

[1] Selvakumar T, et al. *Cancer Epidemiol.* 2023; 86: 102412.

[2] Longley DB, et al. *Nat. Rev. Cancer* 2003; 3: 330–338.

[3] Misiak P, et al. *J. Mater. Chem. B* 2024.



S10 KS05

Nanocząstki poli(hydroksyalkanianów) jako nowa platforma do dostarczania substancji aktywnych – opracowanie i charakterystyka

Rafał Szostecki, Maciej Guzik, Magdalena Procter, Krzysztof Szczepanowicz

*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk;
ul. Niezapominajek 8 30-239 Kraków;
rafal.szostecki@ikifp.edu.pl*

Nanoformulacje polimerowe odgrywają coraz większą rolę we współczesnej biomedycynie, umożliwiając zwiększenie skuteczności terapii poprzez kontrolowane i przedłużone uwalnianie substancji aktywnych, ich ukierunkowane dostarczanie oraz ułatwienie pokonywania barier biologicznych. Wśród materiałów wykorzystywanych do ich otrzymywania szczególne znaczenie mają biodegradowalne i biokompatybilne poli(hydroksyalkaniany) (PHA), stanowiące obiecującą alternatywę dla powszechnie stosowanych polimerów syntetycznych. Celem pracy było opracowanie i scharakteryzowanie nanocząstek opartych na wybranych PHA oraz porównanie ich właściwości z nanocząstkami otrzymanymi z kopolimeru poli(kwasu mlekowego-co-glikolowego) (PLGA), wykorzystanego jako materiał referencyjny.

Nanocząstki otrzymano metodą nanoprecypitacji. Wpływ rodzaju zastosowanego polimeru oraz parametrów procesu na właściwości otrzymanych nanoformulacji oceniono metodą dynamicznego rozpraszania światła (DLS) oraz elektroforetycznego rozpraszania światła, wyznaczając średnicę hydrodynamiczną, wskaźnik polidispersyjności (PDI) i potencjał zeta. Otrzymane nanoformulacje charakteryzowały się średnicą hydrodynamiczną w zakresie 45–200 nm, wartościami PDI poniżej 0,2 oraz potencjałem zeta około -30 mV. Ich biogodność określono metodą MTT na podstawie aktywności metabolicznej ludzkich keratynocytów, wykazując żywotność komórek przekraczającą 80% dla stężeń cząstek do 10 $\mu\text{g/mL}$. Skuteczność funkcjonalizacji powierzchni nanocząstek z wykorzystaniem poli(alkoholu winylowego) (PVA) stwierdzono na podstawie poprawy stabilności układu w warunkach podwyższonej siły jonowej oraz spadku bezwzględnej wartości potencjału zeta. Morfologię nanoformulacji oceniono metodą skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), potwierdzając kulisty kształt. Możliwość enkapsulacji związków hydrofobowych potwierdzono poprzez załadowanie modelowego zancznika fluorescencyjnego kumaryny-6 (C6) oraz substancji o działaniu przeciwdrobnoustrojowym. Efektywność enkapsulacji, oznaczona metodą spektrofotometrii UV–Vis, wyniosła powyżej 80% dla obydwu związków. Uzyskane wyniki wskazują, że nanocząstki oparte na PHA stanowią obiecującą platformę do opracowywania systemów dostarczania substancji aktywnych.



S10 KS06

Amfifilowe pochodne poliaminokwasów jako potencjalne platformy nanonośnikowe dla hydrofobowych substancji czynnych

Anna Chrzaszcz, Krzysztof Szczepanowicz

*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera, Polskiej Akademii Nauk,
Niezapominajek 8, 30-239 Kraków, Polska;
anna.chrzaszcz@ikifp.edu.pl*

Nanomedycyna stanowi jeden z najszybciej rozwijających się obszarów współczesnej medycyny, oferując innowacyjne rozwiązania w zakresie diagnostyki, obrazowania oraz terapii wielu schorzeń. Szczególnie istotną rolę odgrywają nanonośniki umożliwiające kontrolowane i celowane dostarczanie substancji aktywnych, co pozwala zwiększyć skuteczność terapeutyczną przy jednoczesnym ograniczeniu działań niepożądanych wynikających z ich nieselektywnej dystrybucji w organizmie. Wśród licznych systemów dostarczania leków szczególne zainteresowanie budzą amfifilowe nanostruktury zdolne do samoorganizacji w środowisku wodnym. Dzięki jednoczesnej obecności fragmentów hydrofilowych i hydrofobowych mogą one spontanicznie tworzyć stabilne struktury, takie jak micelle, umożliwiając efektywne enkapsulowanie związków słabo rozpuszczalnych w wodzie oraz ich kontrolowane uwalnianie.

W niniejszej pracy przedstawiono badania nad modyfikacją wybranych poliaminokwasów: poli(L-lizyny) (PLL) oraz poli(kwasu glutaminowego) (PGA), poprzez wprowadzenie do ich struktury hydrofobowych fragmentów, celem otrzymania amfifilowych pochodnych. Wprowadzenie części hydrofobowych zachodziło z wykorzystaniem reakcji sprzęgania EDC/NHS, a dobór warunków syntezy umożliwił otrzymanie układów o zróżnicowanym stopniu podstawienia. Wpływ modyfikacji na właściwości fizykochemiczne otrzymanych materiałów oceniono na podstawie analizy rozmiaru cząstek metodą dynamicznego rozpraszania światła (DLS), pomiarów potencjału zeta, spektroskopii FTIR oraz mikroskopii cryo-SEM. Ponadto zbadano wpływ modyfikacji hydrofobowej na zdolność otrzymanych pochodnych do oddziaływania z hydrofobowymi cząsteczkami modelowymi, wykorzystując pomiary fluorescencji próbek po dodaniu sond fluorescencyjnych: czerwieni nilu (Nile Red) oraz pirenu.

Otrzymane amfifilowe pochodne poliaminokwasów mogą stanowić obiecującą platformę do projektowania polimerowych nanonośników hydrofobowych substancji aktywnych. Dalsza funkcjonalizacja tych materiałów może umożliwić opracowanie układów reagujących na określone bodźce fizykochemiczne lub biologiczne, zapewniających kontrolowane uwalnianie substancji aktywnych w miejscu docelowym.

Podziękowanie: Praca ta została sfinansowana ze środków przeznaczonych na badania statutowe Instytutu Katalizy i Fizykochemii Powierzchni Polskiej Akademii Nauk.



S10 KS07

Wpływ układów fotoinicjujących na możliwości przetwarzania formulacji fotoutwardzalnych w procesie druku 3D w technologii DLP

Małgorzata Kowalewska¹, Małgorzata Noworyta¹, Roman Popielarz¹, Davy-Louis Versace^{2,3},
Joanna Ortyl^{1,4,5}

¹Politechnika Krakowska, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Warszawska 24, 31-155 Kraków

²Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE)

³Université Paris-Est Créteil (UPEC), UMR CNRS 7182 2–8 rue Henri Dunant, 94320 Thiais, France

⁴Photo HiTech Ltd., Bobrzyńskiego 14, 30-348 Kraków

⁵Photo4Chem Ltd., Lea 114, 30-133 Kraków

m.kowalewska@doktorant.pk.edu.pl

Technologie addytywne wykorzystujące procesy fotopolimeryzacji umożliwiają szybkie i precyzyjne wytwarzanie struktur trójwymiarowych o złożonej geometrii. Wśród dostępnych metod szczególne znaczenie zyskuje druk 3D wykorzystujący technologię cyfrowego przetwarzania światła (Digital Light Processing, DLP). Jednym z kluczowych czynników wpływających na możliwość wykorzystania kompozycji fotoutwardzalnych w technologii druku 3D są właściwości zastosowanego układu fotoinicjującego. Charakterystyka układu inicjującego determinuje przebieg reakcji fotopolimeryzacji, wpływając na efektywność utwardzania, co przekłada się na warunki prowadzenia procesu drukowania oraz jakość odwzorowania geometrii zaprojektowanych struktur.

Celem pracy było zbadanie wpływu rodzaju i składu układu fotoinicjującego na zachowanie kompozycji fotoutwardzalnych podczas procesu drukowania 3D z wykorzystaniem technologii DLP. Analizie poddano fotoutwardzalne kompozycje zawierające różne systemy fotoinicjujące, obejmujące jedno- oraz wieloskładnikowe układy fotoinicjujące. Przygotowane kompozycje wykorzystano do otrzymywania struktur przestrzennych. Określono warunki prowadzenia procesu, uwzględniając właściwości zastosowanych układów inicjujących, a następnie oceniono jakość otrzymanych struktur oraz dokładność odwzorowania geometrii modelu przy użyciu mikroskopii optycznej.

Przeprowadzone badania pozwoliły lepiej poznać zależności pomiędzy składem kompozycji fotoutwardzalnych a ich zachowaniem podczas procesu druku 3D. Uzyskane rezultaty mogą stanowić podstawę do dalszego projektowania materiałów fotopolimerowych przeznaczonych do zastosowań w technologiach addytywnych.

Badania zostały sfinansowane przez Fundację ORLEN im. Ignacego Łukasiewicza w ramach grantu „TURBOgrant” nr projektu DKN/00057/2025



S10 KS08

Wpływ mechanizmu polimeryzacji na właściwości strukturalne wydruków 3D VAT

Jakub Pietraszewski¹, Monika Topa-Skwarczyńska¹, Patryk Szymaszek¹, Joanna Ortyl^{1,2,3}

¹ Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki w Krakowie, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków, Polska.

² Photo HiTech, ul. Bobrzyńskiego 14, 30-348 Kraków, Polska.

³ Photo4Chem, ul. Lea 114, 30-348 Kraków, Polska.

jakub.pietraszewski@student.pk.edu.pl

W badaniach dokonano analizy wpływu mechanizmu polimeryzacji na właściwości materiałów stosowanych w technologiach druku 3D typu VAT. Badania obejmowały porównanie układów rodnikowych i kationowych, zarówno w postaci czystej, jak i modyfikowanej dodatkiem hydroksypatytu. Kluczowym elementem analizy było określenie zmian masy ciekłej żywicy przed i po procesie druku, co pozwoliło na ocenę strat materiałowych.

Dodatkowo przeprowadzono pomiary wymiarów otrzymanych wydruków, umożliwiające określenie skurczu polimeryzacyjnego. Na podstawie uzyskanych danych wyznaczono zmiany naprężeń wewnętrznych oraz oszacowano porowatość materiałów. Wykazano istotne różnice pomiędzy badanymi systemami, gdzie układy rodnikowe charakteryzowały się szybszą kinetyką polimeryzacji, lecz większym skurczem, podczas gdy systemy kationowe wykazywały bardziej kontrolowany przebieg procesu i niższe wartości naprężeń.

Dodatek hydroksypatytu wpływał na właściwości układów w sposób zależny od mechanizmu polimeryzacji, głównie w kontekście modyfikacji porowatości. Uzyskane wyniki wskazują na istotną rolę zarówno mechanizmu inicjacji, jak i obecności napelnacza w końcowych właściwościach materiałów drukowanych. Badania te mogą stanowić podstawę do dalszej optymalizacji formulacji żywic, szczególnie w zastosowaniach biomedycznych, takich jak druk 3D w stomatologii.

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w ramach programu LIDER, numer grantu LIDER13/0156/2022.



S10 KS09

Nowe systemy fotoinicjujące na bazie aminopochodnych benzylidenoacetonu w aplikacjach druku 3D

Michał Sula¹; Filip Petko¹; Andrzej Świeży¹; Patryk Szymaszek¹; Katarzyna Starzak¹;
Joanna Ortyl^{1,2,3}

*1 Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej,
Warszawska 24, 31-155 Kraków, Polska*

2 Photo HiTech Sp. z o.o., Bobrzyńskiego 14, 30-348 Kraków, Polska

3 Photo4Chem Sp. z o.o., Juliusza Lea 114 / 416A, 416B, 30-133 Kraków, Polska

michal.sula@student.pk.edu.pl

Rozwój technologii fotopolimeryzacji wymaga opracowania wydajnych i proekologicznych systemów fotoinicjujących, stanowiących alternatywę dla toksycznych związków typu TPO oraz nie absorbujących w zakresie widzialnym soli jodoniowych. W ramach pracy zsyntezowano nową grupę związków przeznaczonych do systemów inicjujących fotopolimeryzację rodnikową oraz kationową, opartych na aminopochodnych benzylidenoacetonu. Celem badań było przesunięcie aktywności spektralnej chromoforów w stronę energooszczędnych źródeł światła typu LED.^{1,2}

Zaprojektowano dwuskładnikowe systemy inicjujące, w których badane pochodne pełniły rolę donorów elektronów w parach z solami jodoniowymi oraz akceptorów elektronów w systemach z koinicjatorami aminowymi. Mechanizmy fotochemiczne przeanalizowano na podstawie widm UV-Vis oraz potencjałów elektrochemicznych uzyskanych metodą woltamperometrii cyklicznej. Kinetykę fotopolimeryzacji rodnikowej i kationowej monitorowano w czasie rzeczywistym techniką RT-FTIR przy naświetlaniu diodą o długości fali 405 nm kompozycji akrylanowych oraz epoksydowych.

Wyniki potwierdziły wysoką reaktywność i wydajność fotochemiczną opracowanych układów oraz wysoki stopień konwersji grup funkcyjnych. Praktyczne zastosowanie systemów w druku 3D pozwoliło na uzyskanie precyzyjnych struktur trójwymiarowych o wysokiej rozdzielczości i wiernym odwzorowaniu geometrii. Badania dowiodły, że układy oparte na modyfikowanych pochodnych benzylidenoacetonu stanowią skuteczną alternatywę dla komercyjnych fotoinicjatorów, a zaprojektowane struktury sensybilizatora umożliwia efektywne sterowanie procesem polimeryzacji w nowoczesnych technologiach przyrostowych.

Podziękowanie: Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Badań i Rozwoju w ramach projektu LIDER pod tytułem: “Nowe innowacyjne kompozytowe materiały konstrukcyjno-naprawcze utwardzane na drodze wysoce energooszczędnej fotoindukowanej polimeryzacji frontальной”, numer projektu: LIDER15/0374/2024.

[1] Z. Chen, Y. Zhang, B. Chisholm, D. Webster, J. Polym. Sci. A – Polym. Chem., 2008, 46, 4344-4351

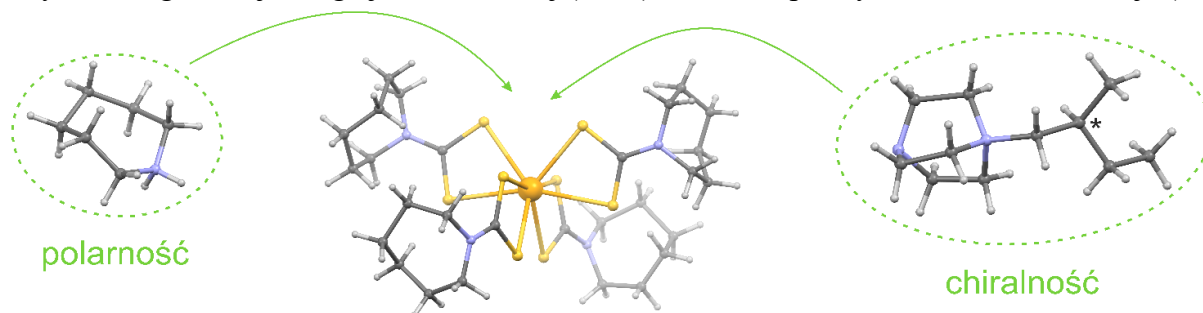
[2] M. Topa, E. Hola, M. Galek, F. Petko, M. Pilch, R. Popielarz, F. Morlet-Savary, B. Graff, J. Lalevée, J. Ortyl, Polym. Chem., 2020, 11, 5261-5278

Wielofunkcyjne materiały molekularne oparte na kompleksach lantanowców z ligandami ditiokarbaminianowymi

Jan Sierżęga, Michał Heczko, Szymon Chorąży

Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, Grupa Wielofunkcyjnych Materiałów Luminescencyjnych;
 Gronostajowa 2, 30-387 Kraków, Polska;
 jan.sierzega@student.uj.edu.pl

Materiały molekularne wzbudzają szerokie zainteresowanie badawcze ze względu na możliwość ich projektowania za pomocą syntetycznego podejścia samoskładania molekularnych bloków budulcowych. Dzięki racjonalnie wybranym ligandom organicznym oraz jonom metali o dobrze znanej charakterystyce możliwe jest projektowanie nowych materiałów molekularnych wykazujących właściwości fotoluminescencyjne, nieliniowe optyczne i chiro-optyczne, magnetyczne i elektryczne.^[1] Taka strategia umożliwia również syntezę wielofunkcyjnych materiałów molekularnych, które łączą kilka różnych właściwości, co zwiększa możliwości ich zastosowania w sensorach, bioobrazowaniu, elektronice i przełącznikach molekularnych.^[2, 3] W tym kontekście kompleksy lantanowców(III) są dobrze znane ze względu na ich cenne właściwości luminescencyjne i magnetyczne.^[4, 5] W związku z powyższym, w tej prezentacji przedstawiono prace dotyczące zastosowania kompleksów lantanowców(III) (Ln) z ligandami ditiokarbaminianowymi jako molekularnych bloków budulcowych w konstrukcji wielofunkcyjnych, hybrydowych nieorganiczno-organicznych soli jonowych. Otrzymane materiały wykazują ogólny skład $(X)[Ln^{III}(L)_4]$ (X = polarny lub chiralny kation organiczny, L = ligand ditiokarbaminianowy, patrz rysunek poniżej). Dla związku zawierającego jony Sm(III) obserwuje się pomarańczową fotoluminescencję pochodzącą z przejść elektronowych f-f. Jednocześnie obserwowany jest efekt powolnej relaksacji magnetyzacji związany z silną anizotropią magnetyczną wybranych jonów Ln(III). Ponadto, dzięki krystalizacji tych materiałów w polarnej grupie przestrzennej, jak również dzięki możliwości wprowadzenia kationu chiralnego, pojawią się perspektywy dodatkowych właściwości, takich jak piezo-, piro- i ferroelektryczność, generacja drugiej harmonicznej (SHG) i kołowo spolaryzowana luminescencja (CPL).



Referencje

- [1] J. J. Zakrzewski, M. Liberka, J. Wang, S. Chorazy, S. Ohkoshi, "Optical Phenomena in Molecule-Based Magnetic Materials", *Chem. Rev.* **2024**, 124, 5930.
- [2] Y. Qin, P. She, X. Huang, W. Huang, Q. Zhao, "Luminescent manganese(II) complexes: Synthesis, properties and optoelectronic applications", *Coord. Chem. Rev.* **2020**, 416, 213331.
- [3] S. V. Eliseeva, J.-C. G. Bünzli, "Lanthanide luminescence for functional materials and bio-sciences", *Chem. Soc. Rev.* **2010**, 39, 189.
- [4] S. K. Gupta, R. Murugavel, "Enriching lanthanide single-ion magnetism through symmetry and axiality", *Chem. Commun.* **2018**, 54, 3685.
- [5] R. Jankowski, M. Wyczesany, S. Chorazy, "Multifunctionality of luminescent molecular nanomagnets based on lanthanide complexes", *Chem. Commun.* **2023**, 59, 5961.

Synteza i charakterystyka nanocząstek srebra stabilizowanych kationowymi surfaktantami wieloładunkowymi

Weronika Trojan, Sebastian J. Balicki, Łukasz Lamch, Kazimiera A. Wilk

Afiliacja: Katedra Inżynierii i Technologii Procesów Chemicznych, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Polska
 265643@student.pwr.edu.pl

Rosnące zainteresowanie nanocząsteczkami srebra (AgNPs) wynika z ich wszechstronnego potencjału aplikacyjnego. W sektorze biomedycznym pełnią one funkcję aktywnych składników materiałów o działaniu przeciwbakteryjnym, elementów wykorzystywanych w diagnostyce, nośników związków terapeutycznych oraz komponentów nowoczesnych powłok funkcjonalnych.

W syntezie koloidalnych nanocząsteczek srebra (AgNPs) istotną rolę odgrywają kationowe surfaktanty wieloładunkowe, które pełnią funkcję związków stabilizujących (ang. *capping agents*). Ich skuteczność wynika z budowy cząsteczki – dodatnio naładowane grupy hydrofilowe sprzyjają adsorpcji na powierzchni nanocząsteczek, natomiast hydrofobowe łańcuchy alkilowe zapewniają barierę steryczną ograniczającą proces agregacji. Szczególnie korzystne właściwości wykazują surfaktanty typu *dicephalic*, wyposażone w dwa ugrupowania hydrofilowe oraz jeden łańcuch hydrofobowy. Taka budowa cząsteczki umożliwia efektywną stabilizację otrzymywanych koloidów typu AgNPs.

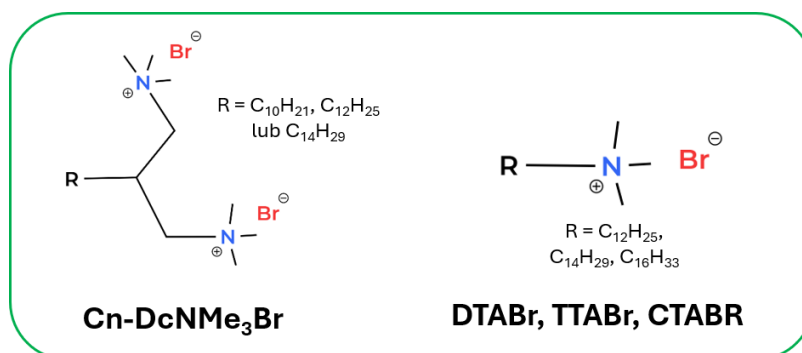


Figura 1. Struktury chemiczne wykorzystanych w badaniach surfaktantów

W niniejszej pracy do stabilizacji nanocząsteczek srebra zastosowano nowo zsyntetyzowane wieloładunkowe surfaktanty kationowe – dibromki 2-dodecylo-N,N,N,N',N'-heksametylopropano-1,3-amoniowe (Cn-DcNMe₃Br; n = 10, 12, 14) [1]. Ocenę ich właściwości przeprowadzono poprzez analizę długoterminowej stabilności koloidów AgNPs (do 2 miesięcy), a uzyskane wyniki zestawiono z efektami otrzymanymi dla konwencjonalnych bromków *n*-alkilotrimetyloamoniowych, obejmujących bromek dodecylotrimetyloamoniowy (DTABr), bromek tetradecylotrimetyloamoniowy (TTABr) oraz bromek cetylotrimetyloamoniowy (CTABr). Podczas charakterystyki nanocząstek srebra wykorzystano takie metody analityczne jak spektroskopia UV-Vis, spektroskopia ATR-FTIR, dynamiczne rozpraszanie światła (DLS) oraz pomiary ruchliwości elektroforetycznej (potencjał zeta) w celu oceny stabilności układów koloidalnych nanocząstek srebra oraz wyznaczenia rozmiarów uzyskanych AgNPs.

Projekt współfinansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki (NCN) w ramach programu OPUS 23 (2022/45/B/ST4/01184).

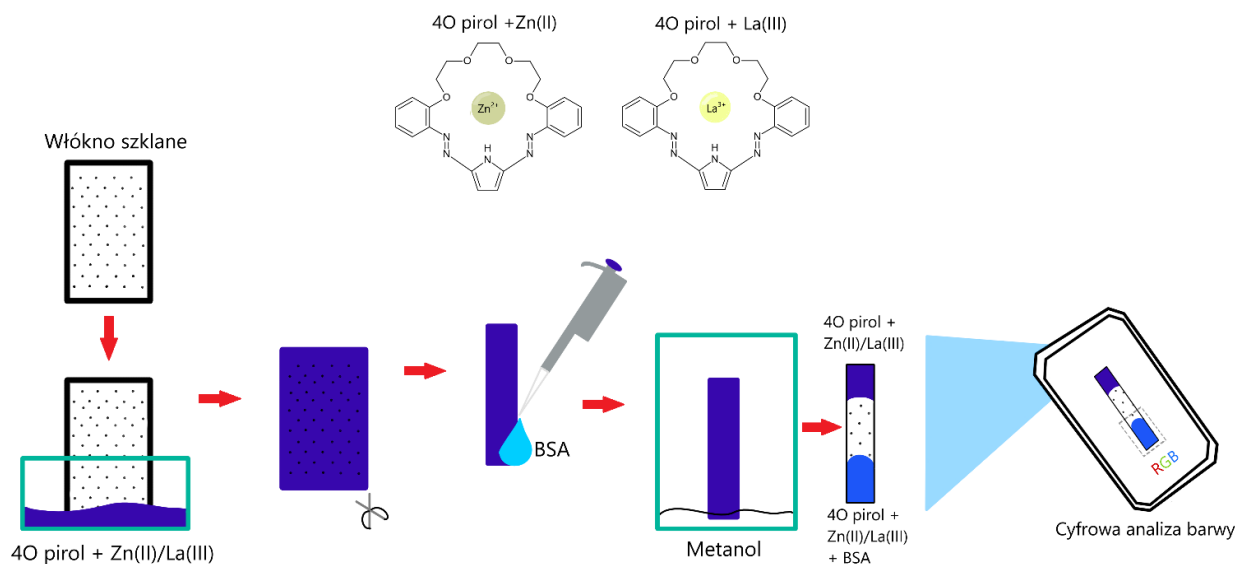
[1] Ł. Lamch, I. Leszczyńska, D. Długowska, W. Szczęśna - Górniak, P. Batys, E. Jarek, K.A. Wilk, P. Warszyński, Langmuir 2025, 41, 12, 8125–8137.

Nowe materiały czujnikowe do kolorymetrycznego wykrywania albuminy surowicy bydlęcej (BSA)

Michał Aszyk, Weronika Baczyńska, Izabela Grzelczyk, Oliwia Rudzińska,
Ewa Wagner-Wysiecka

Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii i Technologii Materiałów Funkcjonalnych, ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk, michal.aszyk@pg.edu.pl

Albumina surowicy bydlęcej (ang. Bovine Serum Albumin, BSA) jest najobficiej występującym białkiem osocza krwi bydła. Ze względu na swoje właściwości jest jednym z najczęściej badanych białek modelowych w chemii, biologii i medycynie. [1-3] BSA jest alergenem pokarmowym obecnym w mleku krowim i mięsie wołowym. [4] W badaniach nad BSA oraz do jej wykrywania i oznaczania wykorzystuje się m.in. techniki spektrofotometryczne, spektrofluorymetryczne i elektrochemiczne [1,2,5]. Alternatywą mogą być metody kolorymetryczne oparte na cyfrowej analizie barwy z użyciem urządzeń mobilnych. Pozwalają one na wykrywanie analitu poza laboratorium. [3] Zaproponowano kompleksy cynku(II) lub lantanu(III) z bisazowym związkiem makrocyclicznym z resztą pirolu [6], które po unieruchomieniu na odpowiednich nośnikach stanowią materiały sensorowe czułe na BSA. Układy zaprojektowano w oparciu o koncepcję wypierania wskaźnika (ang. Indicator Displacement Assay, IDA). Zmiany barwy układów w obecności BSA rejestrowano z wykorzystaniem cyfrowej analizy barwy. Stwarza to możliwość opracowania szybkich, tanich i prostych w użyciu metod wykrywania BSA.



Rys. 1. Schemat kolorymetrycznego wykrywania BSA z wykorzystaniem materiałów sensorowych opartych na kompleksach cynku(II) i lantanu(III) z makrocyclicznym związkiem bisazowym unieruchomionych na włóknie szklanym.

1. H. Dezhmpanah, A. Mohammadi, A. Mousazadeh Moghaddam Pour, *J. Biomol. Struct. and Dynamics*, 2023, 41(3), 970-981
2. Y. Z. Zhang, X. X. Chen, J. Dai, X. P. Zhang, Y. X. Liu, Y. Liu, *Luminescence*, 2008, 23(3), 150-156
3. Y. Hao, F. Ji, T. Li, M. Tian, X. Han, F. Chai, *Food Chem.*, 2024, 446, 138843
4. P. Restani, C. Ballabio, A. Cattaneo, P. Isoardi, L. Terracciano, A. Fiocchi, *Allergy*, 2004, 59, 21-24.
5. D. Duan, H. Yang, Y. Ding, D. Ye, L. Li, G. Ma, *Electrochimica Acta*, 2018, 261, 160-166
6. B. Galiński, E. Wagner-Wysiecka, *Sens. Actuators: B. Chem.*, 2022, 361, 131678.



S10 KS13

Hybrydowe nanozymy magnetyczne: wpływ modyfikacji polifenolowych na właściwości katalityczne i potencjał bioanalityczny

Jan Górniaszek^{ab}, Lorico Delos Santos Lapitan Jr^b, Kiryl Herman^a, Maciej Trzaskowski^b, Mariusz Pietrzak^{ab}

^aKatedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska

^bDział Diagnostyki Medycznej, Centrum Zaawansowanych Materiałów i Technologii CEZAMAT PW
adres korespondencyjny; ul. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa
e-mail: jan.gorniaszek.dokt@pw.edu.pl

Nanozymy stanowią intensywnie rozwijaną grupę nanomateriałów zdolnych do naśladowania aktywności katalitycznej enzymów naturalnych, oferując jednocześnie wysoką stabilność oraz możliwość kształtowania ich właściwości poprzez modyfikację powierzchni. Szczególne zainteresowanie budzą hybrydowe nanozymy magnetyczne, łączące możliwość magnetycznej separacji z szerokimi możliwościami funkcjonalizacji powierzchni.

Celem pracy było zbadanie wpływu powłok polifenolowych na właściwości katalityczne oraz możliwości dalszej funkcjonalizacji hybrydowych nanozymów. Otrzymane nanostruktury składały się z magnetycznych rdzeni otrzymanych dwiema metodami syntezy, dekorowanych nanowypami metali szlachetnych, a następnie pokrywanych warstwami wybranych związków polifenolowych o zróżnicowanej strukturze chemicznej.

Porównano wpływ rodzaju rdzenia magnetycznego, zastosowanego metalu szlachetnego oraz składu powłoki polifenolowej na właściwości funkcjonalne otrzymanych nanozymów. Przeprowadzono charakterystykę fizykochemiczną materiałów oraz oceniono ich aktywność peroksydazopodobną i oksydazopodobną z wykorzystaniem wybranych testów kolorymetrycznych. Oceniono również możliwość wykorzystania powłok polifenolowych jako warstwy pośredniczącej w immobilizacji biomolekuł oraz zaprezentowano zastosowanie w konstrukcji testów immunosorpcyjnych.

Wykazano, że zarówno skład chemiczny powłok polifenolowych, jak i warunki ich tworzenia wpływają na aktywność peroksydazopodobną i oksydazopodobną oraz potencjał dalszej modyfikacji powierzchni nanozymów. Opracowana strategia funkcjonalizacji stanowi podstawę do opracowania wielofunkcyjnych platform do zastosowań bioanalitycznych.



S10 KS14

Aptamery jako zamienniki przeciwciał w testach immunoenzymatycznych: test NLASA alternatywą dla testu NLISA

Monika Śmigielska^{a,b}, Justyna Jazowska^a, Maciej Trzaskowski^b, Mariusz Pietrzak^{a,b}

^a*Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska
ul. Stanisława Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa, Polska*

^b*Dział Diagnostyki Medycznej, Centrum Zawansowanych Materiałów i Technologii, CEZAMAT, ul. Poleczki
19, 02-822, Warszawa, Polska*

monika.smigielska.dokt@pw.edu.pl

Zastosowanie przeciwciał stanowi podstawę testu ELISA (Enzyme-Linked Immunosorbent Assay), który pozostaje złotym standardem w analizach biomedycznych. W ostatnich latach intensywnie rozwijane są testy NLISA (Nanozyme-Linked Immunosorbent Assay), które wykorzystują nanozymy jako zamienniki enzymów.¹ Zarówno ELISA, jak i NLISA działają w oparciu o przeciwciała służące do selektywnego rozpoznawania analitu. W ramach prezentowanych badań zastąpiono klasyczne przeciwciała aptamerami, otrzymując test ELASA (Enzyme-Linked Aptamer Sorbent Assay), a następnie NLASA (Nanozyme-Linked Aptamer Sorbent Assay). Połączenie aptamerów z nanozymami pozwala wyeliminować ograniczenia związane z niestabilnością enzymów i przeciwciał. Aptamery to jednoniciowe oligonukleotydy DNA lub RNA. Wykazują wysoką selektywność względem wielu analitów. Stanowią obiecującą alternatywę dla przeciwciał dzięki większej stabilności chemicznej oraz termicznej. Dodatkowo mogą być szybko i tanio wyprodukowane z wykorzystaniem syntezy chemicznej i charakteryzują się wysoką powtarzalnością serii produkcyjnych.²

Prezentacja będzie dotyczyć wykorzystania hybrydowych nanocząstek $\text{Fe}_3\text{O}_4@\text{AuNPs}@\text{Au}@\text{Pt}$ jako elementów generujących sygnał w teście NLASA. Magnetyczny rdzeń Fe_3O_4 umożliwia łatwą separację z wykorzystaniem pola magnetycznego. Złoto na powierzchni umożliwia immobilizację aptamerów przez wiązanie z grupami tiolowymi. Dodatek platyny wzmacnia aktywność katalityczną, co pozwala na poprawę czułości metody. Opracowana platforma została zaprojektowana do selektywnego wykrywania mucyny (MUC1), glikoproteiny będącej biomarkerem onkologicznym o podwyższonej ekspresji w wielu nowotworach. Proponowany test NLASA łączy zalety aptamerów i nanozymów, stając się innowacyjną alternatywą dla klasycznych testów ELISA i NLISA.

¹ Ivanova P., Drozd M., Michrowski K., Karoń S., Mazurkiewicz-Pawlicka M., Pietrzak M., Biosens. Bioelectron. 2023, 237, 115511.

² Toh S. Y., Citartan M., Gopinath S. C. B., Tang T.-H., Biosens. Bioelectron. 2015, 64, 392–403.



S10 KS15

Magnetokatalityczne nanocząstki jako wielofunkcyjne znaczniki immunotestów serologicznych

Karolina Porycka^{1,2}, Marcin Drozd^{1,2}, Elżbieta Malinowska²

1. *Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska, ul. Stanisława Noakowskiego 3, 00-664, Warszawa, Polska;*
2. *Dział Diagnostyki Medycznej, Centrum Zaawansowanych Materiałów i Technologii CEZAMAT, Politechnika Warszawska, ul. Poleczki 19, 02-822, Warszawa, Polska;*

adres korespondencyjny;
karolina.porycka.dokt@pw.edu.pl

Testy serologiczne stanowią podstawę diagnostyki wielu chorób zakaźnych i autoimmunologicznych, jednak ich parametry analityczne są często pogarszane przez złożoność matrycy biologicznej analizowanych próbek. W klasycznych testach immunoenzymatycznych (ELISA) kluczowym wyzwaniem są interferencje matrycowe wynikające z niespecyficznej adsorpcji białek surowicy, obecności endogennych immunoglobulin oraz aktywności katalitycznej składników próbki. Zjawiska te prowadzą do zwiększenia sygnału tła, pogorszenia stosunku sygnału do szumu, obniżenia czułości oraz ograniczenia powtarzalności oznaczeń. Problemy te nabierają szczególnego znaczenia w kontekście miniaturyzacji, automatyzacji oraz rozwoju szybkich platform diagnostycznych typu *Point-of-Care*.

Odpowiedzią na te wyzwania są nowe strategie analityczne wykorzystujące nanomateriały, które integrują procesy separacji i detekcji w obrębie jednej platformy. W przedstawionej koncepcji zastosowano wielofunkcyjne nanocząstki magnetokatalityczne, których właściwości wynikają z połączenia magnetycznego rdzenia, katalitycznie aktywnej powierzchni generującej sygnał analityczny oraz biofunkcjonalizacji zapewniającej selektywne rozpoznawanie analitu. Integracja tych cech w pojedynczej strukturze umożliwia ograniczenie wpływu matrycy biologicznej poprzez wydzielenie analitu przed etapem detekcji. Jednocześnie katalityczne właściwości nanocząstek pozwalają wyeliminować konieczność stosowania klasycznych znaczników enzymatycznych. Przekłada się to na wyższą stabilność immunotestu, uproszczenie procedury oznaczenia oraz otwiera drogę do projektowania stabilniejszych i łatwiejszych w integracji platform analitycznych.

Celem prezentowanych badań jest wskazanie głównych źródeł interferencji w klasycznych testach immunologicznych oraz sposobów ich eliminacji z wykorzystaniem wielofunkcyjnych nanocząstek magnetokatalitycznych. Omówiony zostanie potencjał tej strategii w zwiększaniu czułości, specyficzności oraz odporności platform serologicznych na wpływ matrycy biologicznej. Przedstawione zostaną zasadnicze wyzwania związane z projektowaniem nanocząstek magnetokatalitycznych i ich zastosowaniem w immunotestach – od etapu syntezy i biofunkcjonalizacji, poprzez przeciwdziałanie adsorpcji niespecyficznej, aż po aspekty praktyczne związane z przewidywaną automatyzacją i miniaturyzacją procedury analitycznej. Jako modelowe znaczniki w konstrukcji immunotestów do wykrywania wybranych klas specyficznych przeciwciał w próbkach surowic przedstawione zostaną biokoniuagaty nanocząstek Fe_3O_4 dekorowanych Au i Pt, modyfikowane powierzchniowo wybranymi receptorami białkowymi.



S10 KS16

Nie tylko prąd: ile informacji kryje odpowiedź elektrochemiczna? Mechanistyczna analiza trójelektronowych procesów elektroredukcji jonów metali

Alicja Pawlak^{1*}, Agnieszka Nosal-Wiercińska²

¹*Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, Wydział Chemii*

²*Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Instytut Nauk Chemicznych, Wydział Chemii, Katedra Chemii Analitycznej*

*alicja.pawlak@mail.umcs.pl

Za zmianą odpowiedzi prądowo-potencjałowej bardzo rzadko stoi tylko jedno zjawisko. Rejestrowany sygnał elektrochemiczny jest rezultatem współdziałania transportu masy, kinetyki transferu elektronów oraz procesów zachodzących na granicy faz elektroda/roztwór [1]. Dopiero ich łączna analiza pozwala odczytać z otrzymanego sygnału więcej niż tylko zmianę jego intensywności lub położenia. Szczególnie interesującym przykładem są wieloelektronowe procesy elektroredukcji jonów metali, których przebieg może istotnie zmieniać się wraz z chemicznym otoczeniem depolaryzatora [2,3].

W pracy zestawiono wyniki badań elektroredukcji jonów Bi(III) i In(III), prowadzonych w mieszanych roztworach wodno-organicznych elektrolitu podstawowego. Środowisko reakcji modyfikowano zarówno poprzez zmianę udziału rozpuszczalnika organicznego, jak i poprzez obecność związków wpływających na organizację obszaru przyelektrodowego. Porównanie danych uzyskanych komplementarnymi technikami elektrochemicznymi pozwoliło prześledzić, w jaki sposób zachodzące zmiany przekładają się na kinetykę i mechanizm elektroredukcji. Szczególną uwagę poświęcono zjawiskom adsorpcyjnym oraz tzw. efektowi CAP-PAIR [4], którego występowanie wiąże się z możliwym udziałem powierzchniowych form (tzw. kompleksów aktywnych), pośredniczących w transferze elektronu i może skutkować zarówno katalizą, jak i inhibicją procesu [2-4].

Uzyskane wyniki pokazują, że siła metod elektrochemicznych nie wynika wyłącznie z ich zdolności do łatwej i szybkiej rejestracji odpowiedzi układu. Jest również związana z możliwością jej wielowymiarowej interpretacji. Zestawienie informacji uzyskiwanych w różnych eksperymentach pozwala budować spójny obraz badanego procesu i ujawniać zależności, które pozostają niewidoczne podczas analizy pojedynczego sygnału.

Literatura:

- [1] N. Elgrishi, K.J. Rountree, B.D. McCarthy, E.S. Rountree, T.T. Eisenhart, J.L. Dempsey, *J. Chem. Educ.* (2018) 95 (2) 197-206, DOI: 10.1021/acs.jchemed.7b00361.
- [2] A. Nosal-Wiercińska, M. Martyna, S. Skrzypek, A. Szabelska, M. Wiśniewska, *Appl. Nanosci.* (2022) 12 947-955, DOI: 10.1007/s13204-021-01758-y.
- [3] A. Nosal-Wiercińska, M. Martyna, A. Szabelska, B. Gołębiowska, *ChemPhysChem* (2024) 25, e202300789, DOI: 10.1002/cphc.202300789.
- [4] K. Sykut, G. Dalmata, B. Nowicka, J. Saba, *J. Electroanal. Chem. Interfacial Electrochem.* 90 (1978) 299-302, DOI: 10.1016/S0022-0728(78)80065-5.



S10 KS17

Optymalizacja *de novo* czterohelisowych minibiałek do wiązania peptydów

Paulina Macierzyńska, Łukasz Berlicki

Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Bioorganicznej, ul. Wybrzeże St.
Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław
paulina.macierzynska@pwr.edu.pl

Minibiałka stanowią klasę niewielkich białek zbudowanych z 20–70 aminokwasów, o masie cząsteczkowej zwykle nieprzekraczającej 10 kDa. Charakteryzują się one dobrze zdefiniowaną organizacją przestrzenną oraz wysoką stabilnością konformacyjną, która jest determinowana przede wszystkim przez tworzenie rdzenia hydrofobowego, powstawanie mostków dwusiarczkowych lub kompleksowanie jonów metali [1]. Cechy te, w połączeniu z funkcjonalną wszechstronnością białek naturalnych, czynią minibiałka atrakcyjnym rusztowaniem o dużym potencjale aplikacyjnym w chemii medycznej i biologicznej oraz w projektowaniu nowych cząsteczek wiążących określone cele biologiczne. Niewielki rozmiar minibiałek sprzyja penetracji komórkowej, a także umożliwia efektywną syntezę metodą peptydowej syntezy na nośniku stałym (SPPS), zapewniając precyzyjną kontrolę sekwencji oraz łatwe wprowadzanie modyfikacji chemicznych i niekanonicznych grup funkcyjnych [2, 3].

Prezentowane badania są częścią projektu, którego celem jest opracowanie nowej klasy *de novo* czterohelisowych minibiałek mogących pełnić funkcję uniwersalnego rusztowania do wiązania peptydów. Projektowane konstrukty charakteryzują się obecnością specjalnie ukształtowanej wnęki, której geometria wynika z przestrzennego ułożenia czterech helis. Modyfikacja grup bocznych aminokwasów wyściełających wnękę ma umożliwić dostosowanie jej właściwości do selektywnego rozpoznawania i wiązania wybranych sekwencji peptydowych, co w przyszłości może znaleźć zastosowanie w projektowaniu inhibitorów oddziaływań białko–białko oraz innych cząsteczek o potencjale terapeutycznym.

Punktem wyjścia do badań eksperymentalnych były modele minibiałek zaprojektowane z wykorzystaniem metod komputerowych. W ramach prezentowanych badań przeprowadzono syntezę i charakterystykę dziesięciu wyselekcjonowanych modeli czterohelisowych minibiałek o długości 67 aminokwasów. Otrzymane konstrukty oczyszczano i analizowano metodami HPLC oraz spektrometrii mas, a następnie oceniano ich stabilność termiczną z wykorzystaniem spektroskopii dichroizmu kołowego (CD) oraz metody nanoDSF. Przeprowadzone analizy umożliwiły identyfikację minibiałka o stabilnej strukturze trzeciorzędowej i wysokiej stabilności termicznej, które stanowi obiecujące rusztowanie do dalszego rozwoju tej klasy minibiałek. W kolejnych etapach projektu planowane są szczegółowe badania strukturalne z wykorzystaniem spektroskopii NMR oraz krystalografii rentgenowskiej, które pozwolą na dokładne określenie organizacji przestrzennej otrzymanego minibiałka.

Podziękowanie: Niniejsze badanie zostało dofinansowane przez grant NCN Opus (NCN 2025/57/B/ST5/00990, kierownik: prof. dr hab. inż. Łukasz Berlicki)

1. K. Ożga, Ł. Berlicki, Design and Engineering of Miniproteins. ACS Bio. & Med. Chem. Au. 2022, 2 (4), 316–327.
2. Z. R. Crook, N. W. Nairn, J. M. Olson, Miniproteins as a Powerful Modality in Drug Development. Trends Biochem. Sci. 2020, 45 (4), 332–346. DOI: 10.1016/j.tibs.2019.12.008.
3. E. G. Baker, G. J. Bartlett, K. L. Porter Goff, D. N. Woolfson, Miniprotein Design: Past, Present, and Prospects. Acc. Chem. Res. 2017, 50 (9), 2085–2092. DOI 10.1021/acs.accounts.7b00186.

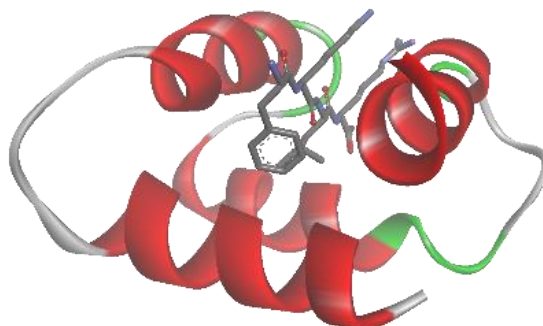
Zaprojektowane komputerowo czterohelisowe minibiałko z wnęką

Kajetan Sołtysiak, Łukasz Berlicki

*Katedra Chemii Bioorganicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Wrocławska,
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

kajetan.soltysiak@pwr.edu.pl

Minibiałka to niewielkie struktury białkowe, najczęściej o masie cząsteczkowej nieprzekraczającej 10 kDa, zdolne do przyjmowania dobrze zdefiniowanej struktury trzeciorzędowej. Dzięki małym rozmiarom, stabilnemu fałdowaniu oraz możliwości racjonalnej modyfikacji sekwencji stanowią atrakcyjne rusztowania do projektowania układów funkcjonalnych [1]. Celem prowadzonych badań jest zaprojektowanie minibiałek zawierających wnękę katalityczną, zdolnych docelowo do wspomagania tworzenia wiązań amidowych oraz ligacji peptydów. Szczególnie interesującym kierunkiem jest otrzymywanie czterohelisowych minibiałek zawierających rowki wiążące, które mogą zapewniać preorganizowane środowisko do rozpoznawania substratów peptydowych i dalszego projektowania sztucznych układów enzymopodobnych. W ramach prowadzonych badań zaprojektowałem czterohelisowe minibiałko z wnęką, zbudowane z 67 reszt aminokwasowych. Do opracowania modelu wykorzystałem pakiet Rosetta, w tym algorytmy FastRelax i FastDesign. Sekwencję zoptymalizowałem pod kątem utworzenia zwartego rdzenia hydrofobowego, który powinien sprzyjać stabilizacji (Rys. 1).



Rys. 1. Model czterohelisowego minibiałka z wnęką wiążącą oraz zadokowanym krótkim peptydem.

W zaprojektowanej strukturze wnęką zlokalizowana jest pomiędzy dwiema helisami i przyjmuje postać rowka wiążącego, odpowiedniego do oddziaływania z wydłużonymi substratami. W celu wstępnej oceny funkcjonalności takiego układu przeprowadziłem dokowanie krótkiego peptydu, co pozwoliło określić jego dopasowanie do kieszeni wiążącej oraz wskazać potencjalne miejsca dalszej modyfikacji modelu. Czterohelisowe rusztowanie traktuję jako punkt wyjścia do projektowania minibiałek o właściwościach katalitycznych.

Podziękowania: Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach grantu OPUS 2025/57/B/ST5/00990. Obliczenia wykonano z wykorzystaniem zasobów Wrocławskiego Centrum Sieciowo-Superkomputerowego.

[1] K. Ożga, Ł. Berlicki, Design and Engineering of Miniproteins, ACS Bio Med Chem Au, 2022, 2, 316–327. DOI 10.1021/acsbiomedchemau.2c00008.

Zastosowanie N-metylowanych analogów fragmentów insuliny w hamowaniu patologicznej agregacji białek neurodegeneracyjnych

Patrycja Grabarczyk, Beata Kolesińska

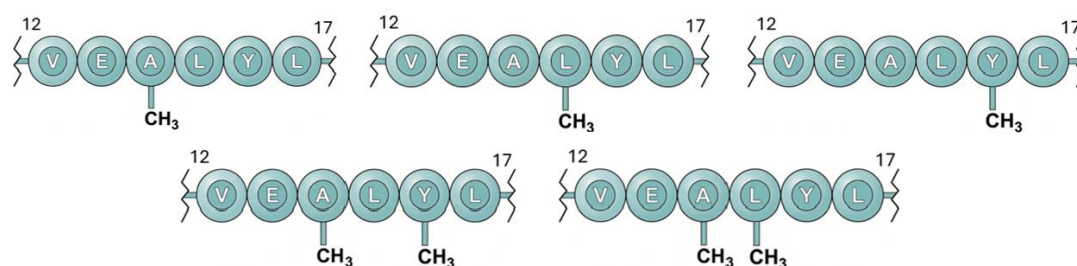
*Instytut Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, Żeromskiego 116, 90-924 Łódź
patrycjagrabarczyk4@gmail.com*

W obliczu globalnego starzejącego się społeczeństwa, choroby neurodegeneracyjne stają się jednym z najpoważniejszych wyzwań medycznych. Dane z 2021 roku wskazują, że dotyczyły one około 3,4 miliarda ludzi na całym świecie i doprowadziły do śmierci 11,1 miliona osób. Do tej grupy schorzeń należą m.in. choroba Alzheimera, Parkinsona oraz stwardnienie zanikowe boczne (ALS). Wszystkie te jednostki chorobowe charakteryzują się patologicznym fałdowaniem białek, które skutkuje ich agregacją i odkładaniem w postaci złogów oraz struktur amyloidowych [1,2].

W Instytucie Chemii Organicznej Politechniki Łódzkiej podjęto badania nad wykorzystaniem N-metylowanych fragmentów insuliny do hamowania tego procesu. Założono, że skoro te zmodyfikowane cząsteczki potrafią powstrzymać agregację samej insuliny, mogą również wchodzić w interakcje z rdzeniami amyloidogennymi innych białek, takich jak β -amyloid 1–42, α -synukleina oraz dysmutaza ponadtlenkowa (SOD1) [3,4]. Wcześniejsze eksperymenty potwierdziły już taką skuteczność dla N-metylowanych analogów pochodzących z sekwencji insuliny A13–19 (LYQLENY) oraz B12–17 (VEALYL) [5].

W prezentowanej pracy otrzymano serię pochodnych fragmentu B12–17 insuliny (Rys. 1), stosując metodę syntezy na podłożu stałym przy użyciu triazynowych odczynników kondensujących [6]. Zsyntetyzowane związki zostały następnie sprawdzone pod kątem ich zdolności do blokowania agregacji fragmentów β -amyloidu 1–42. W testach wykorzystano metody mikroskopowe oraz klasyczne barwniki: czerwień Kongo i tioflawinę T.

Obecnie prowadzone są badania nad dysmutazą ponadtlenkową (SOD1) [3,4] oraz jej zdolnością do tworzenia agregatów. Kolejnym etapem realizowanych prac będzie przetestowanie otrzymanych N-metylowanych inhibitorów pod kątem ich efektywności w hamowaniu agregacji również tego enzymu.



Rys. 1. N-metylowane analogi rdzenia amyloidogennego insuliny

Podziękowania: Badania sfinansowano w ramach programu E2TOP Politechniki Łódzkiej (wsparcie dla Patrycji Grabarczyk). Serdecznie dziękujemy Pani Zofii Wysoczyńskiej za udostępnienie próbek fragmentów β -amyloidu oraz Pani dr hab. inż. Justynie Frączyk, Pani dr inż. Joannie Lewandowskiej i Panu dr Dariuszowi Zielińskiemu za pomoc i wsparcie w realizacji badań.

- [1] Soto, C.; Pritzkow, S. *Nature Neuroscience* **2018**, *21*, 1332–1340.
- [2] Chiti, F.; Dobson, C.M. *Annual Review of Biochemistry* **2017**, *86*, 27–68.
- [3] Selkoe, D.J.; Hardy, J. *EMBO Molecular Medicine* **2016**, *8*, 595–608.
- [4] Knowles, T.P.J.; Vendruscolo, M.; Dobson, C.M. *Nature Reviews Molecular Cell Biology* **2014**, *15*, 384–396.
- [5] Swiontek, M.; Wasko, J.; Frączyk, J.; Galecki, K.; Kamiński, Z.J.; Kolesińska, B. *Molecules* **2019**, *24*, 3706.
- [6] Kolesińska, B.; Rożniakowski, K.K.; Frączyk, J.; Relich, I.; Papini, A.M.; Kamiński, Z.J. *European Journal of Organic Chemistry* **2015**, 401–408.



S10 KS20

Wodnorozpuszczalne fotoinicjatory do zastosowań w bioprintingu 3D – od wymagań aplikacyjnych do biodruku 3D

Małgorzata Kowalewska¹, Andrzej Świeży², Filip Petko^{1,3}, Roman Popielarz¹, Davy-Louis Versace^{3,4}, Joanna Ortyl^{1,5,6}

¹Politechnika Krakowska, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Warszawska 24, 31-155 Kraków

²AGH w Krakowie, Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki, al. A. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków

³Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est (ICMPE)

⁴Université Paris-Est Créteil (UPEC), UMR CNRS 7182 2–8 rue Henri Dunant, 94320 Thiais, France

⁵Photo HiTech Ltd., Bobrzyńskiego 14, 30-348 Kraków

⁶Photo4Chem Ltd., Lea 114, 30-133 Kraków

m.kowalewska@doktorant.pk.edu.pl

Biodruk 3D należy obecnie do najszybciej rozwijających się technologii w obszarze inżynierii tkankowej i medycyny regeneracyjnej. Umożliwia on precyzyjne wytwarzanie trójwymiarowych struktur zawierających biomateriały oraz żywe komórki, otwierając nowe możliwości w zakresie otrzymywania modeli tkanek, systemów do badań *in vitro* oraz konstrukcji przeznaczonych do zastosowań medycznych. Dynamiczny rozwój tej technologii wymaga jednak opracowania nowych materiałów i komponentów zapewniających wysoką efektywność procesu przy jednoczesnym zachowaniu biozgodności.

Jednym z kluczowych elementów systemów stosowanych w biodruku opartym na fotopolimeryzacji są fotoinicjatory, odpowiedzialne za zapoczątkowanie sieciowania pod wpływem promieniowania świetlnego. Związki te powinny charakteryzować się dobrą rozpuszczalnością w środowisku wodnym, wysoką aktywnością inicjującą oraz możliwie niską cytotoksycznością. Poszukiwanie nowych, wodnorozpuszczalnych fotoinicjatorów stanowi zatem istotny kierunek badań, mający na celu zwiększenie bezpieczeństwa i efektywności procesów biodrukowania.

W niniejszej pracy przedstawiono wstępne wyniki badań nowych, wodnorozpuszczalnych fotoinicjatorów rodnikowych, przeznaczonych do zastosowań w procesach fotopolimeryzacji z perspektywą wykorzystania w biodruku 3D. Scharakteryzowano ich właściwości spektroskopowe oraz oceniono aktywność inicjującą w wybranych kompozycjach fotoutwardzalnych. Uzyskane wyniki stanowią punkt wyjścia do dalszych badań nad zastosowaniem opracowanych związków w biozgodnych materiałach przeznaczonych do biodruku 3D.

Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki (NCN) w ramach projektu OPUS nr UMO-2021/41/B/ST5/04533.



S10 KS21

Wpływ nanododatku TiO_2 na kinetykę fotopolimeryzacji żywicy do stomatologicznego druku 3D

Jakub Pietraszewski¹, Monika Topa-Skwarczyńska¹, Joanna Ortyl^{1,2,3}

¹ Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki w Krakowie, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, ul. Warszawska 24, 31-155 Kraków, Polska.

² Photo HiTech, ul. Bobrzyńskiego 14, 30-348 Kraków, Polska.

³ Photo4Chem, ul. Lea 114, 30-348 Kraków, Polska.

jakub.pietraszewski@student.pk.edu.pl

W badaniach dokonano analizy wpływu dodatku nanocząstek tlenku tytanu (TiO_2) na właściwości fotoutwardzalnych żywic stosowanych w druku 3D. Badane układy oparto na mieszaninie monomerów akrylanowych UDMA/TEGDMA oraz układzie inicjującym Sylanto 7MP z aminą EDB. Celem badań było określenie wpływu stężenia TiO_2 na kinetykę fotopolimeryzacji, stopień konwersji oraz właściwości reologiczne powstających materiałów.

Zastosowano techniki badawcze takie jak spektroskopia Real-Time FT-IR do monitorowania konwersji wiązań podwójnych, analizę Photo-DSC do oceny efektów cieplnych procesu oraz fotoreometrię do śledzenia skurczu polimeryzacyjnego i momentu żelowania. Wyniki wskazują, że obecność TiO_2 wpływa na przebieg procesu fotopolimeryzacji, poprzez efekt rozpraszania światła, jak i możliwe oddziaływania z układem inicjującym. Wraz ze wzrostem zawartości nanododatku obserwowano zmiany szybkości reakcji, co przekłada się na właściwości końcowe materiału.

Uzyskane rezultaty podkreślają znaczenie optymalizacji składu żywic fotoutwardzalnych w kontekście zastosowań w druku 3D. Wprowadzanie TiO_2 umożliwia projektowanie materiałów o lepszych właściwościach mechanicznych, co ma szczególne znaczenie w zastosowaniach inżynierii materiałowej, stomatologicznej i biomedycznej.

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju w ramach programu LIDER, numer grantu LIDER13/0156/2022.



S10 KS22

Wpływ procesu starzenia na zdolność biowęgla i nanobiowęgla do adsorpcji cynku

Katarzyna Urynowicz¹, Monika Raczkiewicz¹, Patryk Oleszczuk¹

¹Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej, Wydział Chemii, Katedra Radiochemii i Chemii Środowiskowej;
Pl. M. Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin;
katarzyna.urynowicz@mail.umcs.pl

Biowęgiel (BC) jest materiałem zyskującym rosnącą popularność jako adsorbent ze względu na swoją porowatość, wysoką powierzchnię właściwą oraz pojemność wymiany kationów [1]. Właściwości te umożliwiają jego zastosowanie do usuwania lub immobilizacji wielu zanieczyszczeń środowiskowych, takich jak pierwiastki potencjalnie toksyczne (PTEs), w tym cynku. Pierwiastek ten jako pierwszy poddano regulacjom pomimo tego, że występuje naturalnie i jako mikroelement uczestniczy w wielu procesach metabolicznych wielu organizmów – to jego zbyt wysokie stężenie może wywoływać działanie toksyczne, szczególnie względem organizmów wodnych [2]. Aktualnie szczególnie interesującym materiałem adsorpcyjnym jest nanobiowęgiel (nBC), otrzymywany na przykład przez mielenie konwencjonalnego BC do nanocząstek [3]. Zwiększony stosunek powierzchni do objętości może przyczyniać się do poprawy jego zdolności adsorpcyjnych, a tym samym zwiększać przydatność nBC w procesach usuwania zanieczyszczeń ze środowiska [3]. Warto jednak zauważyć, że BC uwolniony do środowiska wraz z upływem czasu podlega procesowi starzenia, co wpływa na jego właściwości fizykochemiczne, więc także na zdolność do adsorpcji. Istnieją badania, które wskazują, że wpływ ten jest zależny od temperatury pirolizy [4].

Badaniom poddane zostały BC otrzymane podczas pirolizy następujących materiałów: wikliny (temperatura pirolizy 450°C, 550°C i 650°C), osadu ściekowego (550°C) oraz słomy rzepakowej (550°C). Część każdego z otrzymanych BC poddano mieleniu kulowemu, otrzymując w ten sposób nBC. Część zarówno otrzymanego po pirolizie makrobiowęgla (mBC), jak i nBC, poddano procesowi termicznego starzenia w dwóch temperaturach - 60°C oraz 90°C. Każdy z 30 rodzajów próbek wytrząsano z roztworem jonów cynku o stężeniu 250 ppm przez 1 h, 6 h, 12 h, 24 h i 48 h w celu ustalenia kinetyki procesu. Zbadano również zależność stopnia adsorpcji kationów cynku od jego stężenia w roztworze, wytrząsając próbki przez 24 h z roztworami o następujących stężeniach cynku: 25 ppm, 50 ppm, 75 ppm, 125 ppm, 250 ppm, 500 ppm.

Dla wszystkich niestarzonych BC i nBC pojemność adsorpcyjna jonów cynku mieściła się w zakresie od 9,29 do 53,03 mg/g i 19,83 do 73,70 mg/g, kolejno. W przypadku próbek starzonych w temperaturze 60°C wynosiła od 5,06 do 57,84 mg/g, natomiast dla materiałów starzonych w temperaturze 90°C od 21,04 do 90,65 mg/g. Porównanie tych wartości wskazuje, że starzenie termiczne wpływało na zdolność adsorpcyjną biowęgla, przy czym kierunek i wielkość zmian zależały od rodzaju materiału, stopnia jego rozdrobnienia oraz warunków otrzymywania.

Podziękowanie: Badania zostały przeprowadzone w ramach projektu badawczego nr 2021/42/A/ST10/00161 finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki.

1. Komkiene, J., Baltreinaite, E. *Int. J. Environ. Sci. Technol.* 13, 471-482 (2016). doi: 10.1007/s13762-015-0873-3.
2. Van Sprang, P.A., Verdonck, F.A. et al. *Sci Total Environ.* 407(20):5373-91 (2009). doi: 10.1016/j.scitotenv.2009.06.029.
3. Jadhav, V., Ahire, B., et al. *Environ. Nanotechnol. Monit. Manag.* 23, 101061 (2025), doi: 10.1016/j.enmm.2025.101061.
4. Ke, Y., Cui, S., et al. *Chemosphere.* 296:134051 (2022). doi: 10.1016/j.chemosphere.2022.134051.



S10 KS23

Multifunkcyjne katalizatory - nanozymy magnetyczne łączące aktywność w reakcjach utleniania oraz redukcji do zastosowań bioanalitycznych i medycznych

Paweł Stańczak^{1,2}, Mariusz Pietrzak^{1,2}

¹ Dział Diagnostyki Medycznej, Centrum Zaawansowanych Materiałów i Technologii CEZAMAT, Politechnika Warszawska

² Katedra Biotechnologii Medycznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska
adres korespondencyjny: ¹ ul. Poleczki 19, 02-822 Warszawa; ² ul. Stanisława Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa

e-mail: pawel.stanczak2.dokt@pw.edu.pl

Nanozymy stanowią jedną z najbardziej perspektywicznych grup materiałów wykorzystywanych we współczesnej medycynie i diagnostyce. Charakteryzują się wysoką stabilnością w szerokim zakresie temperatury, pH oraz siły jonowej, a także łatwością funkcjonalizacji z wykorzystaniem elementów biologicznych i chemicznych. Dzięki temu mogą być modyfikowane przeciwciałami do konstrukcji biosensorów, aptamerami do terapii celowanych czy porfirynami zwiększającymi skuteczność terapii fotodynamicznej i innych metod leczenia nowotworów. Dotychczas większość opracowywanych nanozymów wykazuje jednak aktywność katalityczną skupioną na reakcjach utleniania, co zawęża zakres możliwych zastosowań oraz wykorzystywanych substratów. Rozwój nanozymów zdolnych do efektywnego katalizowania zarówno reakcji utleniania, jak i redukcji otwiera nowe możliwości projektowania wielofunkcyjnych platform diagnostycznych i terapeutycznych. Połączenie obu typów aktywności katalitycznej umożliwia wykorzystanie znacznie szerszej grupy substratów, realizację reakcji kaskadowych oraz opracowanie bardziej uniwersalnych układów diagnostycznych, a także terapii przeciwnowotworowej i regulacji procesów redoks zachodzących w organizmie. Integracja wysokiej aktywności katalitycznej powłok z metali bloku d z magnetytowym rdzeniem o właściwościach superparamagnetycznych umożliwia połączenie funkcji katalitycznych i magnetycznych w jednej nanostrukturze. Takie rozwiązanie stwarza nowe możliwości w terapiach celowanych dzięki magnetycznemu sterowaniu i akumulacji nanocząstek w miejscu działania. Jednocześnie właściwości magnetyczne ułatwiają separację docelowych antygenów ze złożonych próbek biologicznych, zwiększając czułość metod diagnostycznych.

Prezentacja będzie dotyczyć prac nad opracowaniem multifunkcyjnych nanostruktur składających się z magnetytowego rdzenia zdobionego wyspami platyny, palladu oraz miedzi. Otrzymano zarówno układy mono-, jak i bimetaliczne (Pt:Pd oraz Pt:Cu), których skład zaprojektowano w oparciu o dane literaturowe oraz doświadczenia zespołu wskazujące na wysoką aktywność platyny w reakcjach utleniania oraz palladu i miedzi w reakcjach redukcji katalizowanych przez nanozymy. Otrzymane nanomateriały scharakteryzowano pod względem morfologii, składu chemicznego oraz rozmiaru z wykorzystaniem skaningowo-transmisyjnej mikroskopii elektronowej (STEM), spektroskopii dyspersji energii promieniowania rentgenowskiego (EDX-RF) oraz spektrofotometrii UV-Vis. Następnie oceniono ich aktywność katalityczną względem typowych substratów stosowanych do oceny nanozymów peroksydazopodobnych, takich jak tetrametylobenzydina (TMB) i N,N-dietylo-p-fenylendiamina (DEPDA), a także substratów wykorzystywanych w reakcjach redukcji, m.in. bromku 3-(4,5-dimetylotiazol-2-yl)-2,5-difenylo-tetrazoliowego (MTT) oraz resazuryny. Połączenie właściwości magnetycznych z aktywnością katalityczną w reakcjach zarówno utleniania, jak i redukcji stwarza możliwość opracowania wyspecjalizowanych nanozymów przeznaczonych do zastosowań w nowoczesnej diagnostyce oraz medycynie, w szczególności w biosensorach i systemach terapii celowanej.



S10 KS24

Ograniczenia obecnych norm ISO 11979 w ocenie starzenia soczewek wewnątrzgałkowych i propozycja wieloczynnikowego modelu badawczego

Maciej Łuczak^{1*}, Katarzyna Witt-Kalicińska², Artur Kościuszko³

¹ Szkoła Doktorska, Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Al. prof. S. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz

² Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz

³ Wydział Inżynierii Mechanicznej, Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Al. prof. S. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz

*e-mail: macluc003@pbs.edu.pl

Procedury oceny zgodności i kontroli jakości soczewek wewnątrzgałkowych (IOL) w ramach Rozporządzenia MDR 2017/745 opierają się na normach serii ISO 11979. Seria norm ISO 11979 stanowi podstawę oceny bezpieczeństwa, właściwości optycznych, mechanicznych i biologicznych soczewek wewnątrzgałkowych. Aktualne podejście do przyspieszonego starzenia wykorzystuje model Arrheniusa, zwykle oparty na założeniu $Q_{10}=2$, zgodnie z którym wzrost temperatury o 10°C powoduje dwukrotne przyspieszenie procesów degradacyjnych. Model ten jest użyteczny w ocenie trwałości wyrobów medycznych, jednak jego wartość predykcyjna dla współczesnych polimerowych IOL pozostaje ograniczona. W soczewkach akrylowych równolegle mogą zachodzić procesy absorpcji wody, hydrolizy, utleniania, relaksacji naprężeń i wymiany jonowej, których szybkość może być odmienna. Dodatkowo izotermiczne testy nie odzwierciedlają cyklicznych zmian temperatury podczas transportu i przechowywania. Uprozczone media badawcze nie modelują także składu cieczy wodnistej ani warunków sprzyjających kalcyfikacji. Obecne wymagania nie obejmują ilościowej oceny glisteningu ani walidowanego modelu in vitro kalcyfikacji soczewek hydrofilowych.

Proponowany wieloczynnikowy model badawczy powinien uwzględniać materiałowo-specyficzne parametry starzenia, cykle termiczne, medium imitujące ciecz wodnistą oraz skorelowaną analizę właściwości optycznych, mechanicznych, chemicznych i powierzchniowych. Takie podejście może zwiększyć kliniczną wartość predykcyjną oceny trwałości IOL i stanowić podstawę przyszłych modyfikacji norm ISO 11979.

Słowa kluczowe: ISO 11979, IOL, soczewki wewnątrzgałkowe, starzenie wieloczynnikowe, ocena ryzyka, biomateriały.

Praca powstała w ramach programu „Doktorat wdrożeniowy” Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego (nr umowy DWD/9/0248/2025).



Sesja posterowa



S10 PS01

Złoto i grafen w diagnostyce: tlenek grafenu jako nowy składnik biosensorów SPR do detekcji interakcji biomolekularnych i zwiększania czułości wykrywania

Anna Chrzaszcz¹, Lilianna Szyk-Warszyńska¹, Rafał Szostecki¹, Agata Pomorska-Gawel¹, Michał Szuwarzyński², Krzysztof Szczepanowicz¹, Tomasz Kruk¹

¹*Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera, Polskiej Akademii Nauk, Niezapominajek 8, 30-239 Kraków, Polska*

²*Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie, Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii, Mickiewicza 30, 30-059 Kraków, Polska;
anna.chrzaszcz@ikifp.edu.pl*

Rozwój zaawansowanych nanostrukturalnych materiałów stwarza nowe możliwości projektowania wysokowydajnych czujników optycznych, w tym opartych na zjawisku powierzchniowego rezonansu plazmonowego (SPR). Biosensory optyczne wykorzystujące SPR są obecnie szeroko stosowane do analizy reakcji biochemicznych w badaniach naukowych, przemyśle farmaceutycznym i spożywczym oraz w diagnostyce medycznej. Integracja tlenku grafenu (GO) z biosensorymi opartymi na SPR stanowi obiecującą strategię zwiększania czułości i selektywności w wykrywaniu w czasie rzeczywistym, bez wykorzystywania znaczników. Dzięki swojej unikalnej strukturze, dużej powierzchni właściwej oraz obecności licznych grup funkcyjnych, tlenek grafenu może wzmacniać sygnał detekcji, a także pełnić funkcję wydajnego interfejsu pomiędzy złotą powierzchnią sensora a biomolekułami.

W niniejszej pracy przedstawiono metodologię modyfikacji złotych powierzchni sensorów SPR z wykorzystaniem tlenku grafenu oraz przeanalizowano wpływ tej funkcjonalizacji na odpowiedź biosensora podczas detekcji analitu. W tym celu opracowano kontrolowaną i powtarzalną metodę osadzania jedno-/wielowarstwowych powłok GO na powierzchniach złota, wykorzystując modelowe kryształy QCM-D oraz dedykowane złote sensory SPR. Powłoki wytwarzano metodą warstwa po warstwie (*ang. Layer-by-Layer, LbL*) z zastosowaniem techniki zanurzeniowej (*ang. dip-coating*). Proces samoorganizacji LbL zachodził pomiędzy warstwami dodatnio naładowanych polielektrolitów (PDADMAC, PEI, PAH lub PLL) a warstwami ujemnie naładowanego tlenku grafenu. W rezultacie otrzymano hybrydowe powłoki o kontrolowanej grubości, rozkładzie ładunku oraz funkcjonalności chemicznej, co umożliwiło bezpośrednie powiązanie ich struktury z właściwościami fizykochemicznymi.

Przeprowadzono kompleksową charakterystykę otrzymanych powłok, obejmującą pomiary z wykorzystaniem mikroskopii sił atomowych (AFM), spektroskopii ATR-FTIR, UV-Vis oraz układu SPR w konfiguracji komórki Kretschmanna, sprzężonego z elipsometrem EP4. W kolejnym etapie badań na powierzchniach niemodyfikowanego złota oraz złota pokrytego warstwami polielektrolit/GO immobilizowano elektrostatycznie roztwory białka – owalbuminy, pełniące rolę modelowego antygeny do dalszej funkcjonalizacji biosensora. Proces adsorpcji i immobilizacji białka monitorowano w czasie rzeczywistym z wykorzystaniem techniki QCM-D, umożliwiającą jednoczesny pomiar zmian częstotliwości rezonansowej oraz dyssypacji energii. Funkcjonalizacja powierzchni z wykorzystaniem tlenku grafenu może znacząco zwiększyć czułość i selektywność sensorów SPR, co czyni ją obiecującym rozwiązaniem dla nowoczesnych platform detekcyjnych. Badania te przyczynią się do poszerzenia wiedzy na temat zastosowania zaawansowanych nanomateriałów, w tym GO, w biochemii układów sensorowych, diagnostyce oraz badaniach biomedycznych.

Podziękowanie: Autorzy dziękują za dofinansowanie badań z projektu NCN-SONATA 18 nr UMO-2022/47/D/ST5/01751, „Nanohybrydowe układy zawierające tlenek grafenu oraz nanocząstki jako funkcjonalne komponenty dla nowego typu biosensorów”.



S10 PS02

Polimery z odciskiem molekularnym na podłożach typu MXene jako selektywne kompozyty elektrochemiczne

Karolina Winkler¹, Wojciech Simka¹, Tiwa Yimyai², Anitha Ethirajan²

¹Katedra Chemii Nieorganicznej, Analitycznej i Elektrochemii, Politechnika Śląska, Gliwice, Polska;

²The Institute for Materials Research of Hasselt University and imec (IUMAT), Hasselt, Belgium

karolina.winkler@polsl.pl

Polimery z odciskiem molekularnym (MIP) stanowią jedną z najbardziej uniwersalnych klas syntetycznych receptorów molekularnych, zdolnych do odwzorowania miejsc wiążących o wysokiej komplementarności geometrycznej i chemicznej względem wybranego analitu. Ich stabilność chemiczna i termiczna oraz możliwość wielokrotnego wykorzystania czynią je atrakcyjną alternatywą dla receptorów biologicznych. Kluczowym etapem projektowania czułych sensorów MIP pozostaje jednak dobór materiału elektrodowego, który determinuje efektywność transferu elektronów oraz właściwości analityczne całego układu. W tym kontekście materiały typu MXene, dzięki wysokiej przewodności elektrycznej, rozwiniętej powierzchni właściwej oraz obecności licznych grup funkcyjnych na powierzchni, stanowią obiecującą platformę do konstrukcji nowoczesnych sensorów elektrochemicznych [1-3].

Celem pracy było opracowanie i porównanie strategii wytwarzania warstw molekularnie imprintowanych na podłożach typu MXene oraz określenie wpływu parametrów syntezy na właściwości elektrochemiczne i selektywność otrzymanych platform przeznaczonych do oznaczania biomarkerów osi immunometabolicznej. Opracowano warstwy MIP otrzymywane metodą elektropolimeryzacji na przewodzących podłożach typu MXene. Przeprowadzono optymalizację procesu poprzez porównanie różnych monomerów funkcyjnych stosowanych do elektropolimeryzacji, w tym aniliny oraz ofenylenodiaminy, a także ocenę wpływu parametrów osadzania warstwy polimerowej oraz metod usuwania cząsteczki wzorcowej. Zbadano wpływ zastosowanych strategii syntezy na morfologię i grubość filmu polimerowego, integralność miejsc rozpoznających oraz właściwości elektrochemiczne otrzymanych platform. Przeanalizowano również zależność pomiędzy rodzajem zastosowanego monomeru, kinetyką transferu elektronów na granicy faz MXene/MIP oraz selektywnością wiązania analitu.

Uzyskane wyniki pozwoliły wskazać optymalną strategię wytwarzania warstw MIP na podłożach typu MXene oraz potwierdziły potencjał opracowanych platform jako nowoczesnych układów elektrochemicznych do selektywnego oznaczania biomarkerów osi immunometabolicznej.

[1] Manikandan, R., Kim, M.-J., Jang, H.-G., Mugunthan, A., Kim, C.-S., Yoon, J.-H., Lee, J., Chung, K. W., Chang, S.-C. (2025). Fabrication of bio-mimic nanozyme based on Mxene@AuNPs and molecular imprinted poly(thionine) films for creatinine detection. *Biosensors and Bioelectronics*, 271, 117075.

[2] Anasori, B., Lukatskaya, M. R., Gogotsi, Y. (2017). 2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage. *Nature Reviews Materials*, 2, 16098.

[3] Ojeda, J., Castillo-Barzola, A., Arauco Bendezú, S. P., da Silva, J. L., Chumbimuni-Torres, K. (2026). Template removal strategies in electropolymerized molecularly imprinted polymers: mechanisms, challenges, and perspectives. *Sensors*, 26, 3742.

Kowalencyjne sieci triazynowe zawierające fluor stosowane jako bioczuJNIKI do elektrochemicznej detekcji DNA

Julia Kołodziejczyk¹, Monica Choudhary², Alex FragoSO², Marta E. Płońska-Brzezińska¹

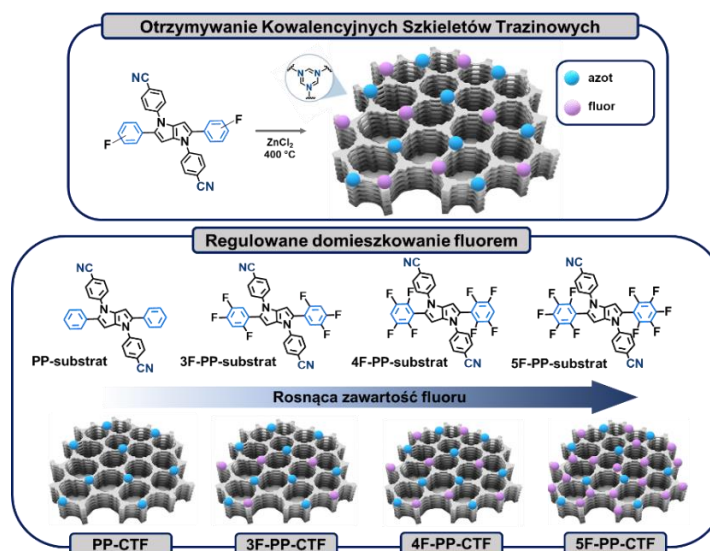
¹Department of Organic Chemistry, Medical University of Białystok, Mickiewicza 2A, 15-222 Białystok, Poland

²Departament d'Enginyeria Química, Universitat Rovira i Virgili, Avda. Països Catalans, 26, 43007 Tarragona, Spain

julia.kolodziejczyk@sd.umb.edu.pl

Fluorowane kowalencyjne sieci triazynowe (z ang. Covalent Triazine Framework, CTF) stanowią obiecującą grupę porowatych materiałów organicznych, których właściwości można precyzyjnie regulować poprzez odpowiedni dobór prekursorów molekularnych. W prezentowanej pracy otrzymano serię CTF o zróżnicowanym stopniu fluorowania (PP-CTF, 3F-PP-CTF, 4F-PP-CTF oraz 5F-PP-CTF) metodą syntezy jonotermicznej z wykorzystaniem pochodnych pirolo[3,2-*b*]pirolu zawierających grupy nitrylowe (Rys.1).¹ Przeprowadzona charakterystyka strukturalna i powierzchniowa potwierdziła powstanie jednorodnych, bogatych w azot mikroporowatych sieci CTF oraz obecność atomów fluoru. Wykazano również, że stopień fluorowania wpływa na skład chemiczny powierzchni oraz morfologię otrzymanych materiałów.

Zsyntetyzowane CTF zastosowano jako warstwy modyfikujące elektrody złote w amperometrycznym biosensorze typu 'sandwich' przeznaczonym do detekcji sekwencji DNA wirusa brodawczaka ludzkiego HPV16.² Umiarkowany stopień fluorowania prowadził do poprawy parametrów analitycznych biosensora, a najlepsze właściwości uzyskano dla materiałów 3F-PP-CTF i 4F-PP-CTF, które charakteryzowały się najwyższą czułością oraz granicą wykrywalności poniżej 1 nM. Otrzymane wyniki wskazują, że kontrolowana fluoracja kowalencyjnych sieci triazynowych stanowi skuteczną strategię projektowania bioczuJNIKÓW do elektrochemicznej detekcji DNA.



Rysunek 1. Otrzymywanie kowalencyjnych szkieletów triazynowych bogatych w fluor.

Podziękowanie: Projekt finansowany ze środków Narodowego Centrum Nauki, grant nr 2023/49/B/ST5/02403 (M.E.P-B).

(1) Kołodziejczyk, J.; Hryniewicka, A.; Brečko, J.; Ciecuch-Tymoniuk, K.; Brzezinski, K.; Plonska-Brzezinska, M. E. Decoding the Role of Porosity and N,S-Doping in Covalent Triazine Framework-Derived Carbons and Their Carbon Nano-Onion Hybrids for Superior Supercapacitors. *ACS Omega* **2026**, *11* (12), 19094–19110. <https://doi.org/10.1021/acsomega.5c11683>.

(2) Civit, L.; FragoSO, A.; Hölters, S.; Dürst, M.; O'Sullivan, C. K. Electrochemical Genosensor Array for the Simultaneous Detection of Multiple High-Risk Human Papillomavirus Sequences in Clinical Samples. *Analytica Chimica Acta* **2012**, *715*, 93–98. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2011.12.009>.



S10 PS04

Wpływ masy cząsteczkowej polikationu PDMAEMA na oddziaływanie z modelowymi błonami lipidowymi keratynocytów i fibroblastów

Monika Binkowska^{1,2}, Kamil Kamiński¹, Katarzyna Hąc-Wydro¹

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

²Uniwersytet Jagielloński, Szkoła Doktorska Nauk Ścisłych i Przyrodniczych, 30-348, Łojasiewicza 11, Kraków

monika1.adamczyk@doctoral.uj.edu.pl

Poli(metakrylan 2-(dimetyloamino)etylu) (PDMAEMA) jest kationowym polimerem wykazującym właściwości przeciwdrobnoustrojowe, w tym aktywność przeciwwgrzybiczą.[1] W strukturze PDMAEMA występują trzeciorzędowe grupy aminowe, które w zależności od warunków środowiska ulegają protonacji, uzyskując dodatni ładunek.[2] Ze względu na potwierdzoną aktywność biocydyczną, polikation PDMAEMA stanowi obiecujący materiał do zastosowania np. w medycynie lub rolnictwie. Zdolność polikationów do oddziaływania z błonami biologicznymi może determinować ich aktywność w kierunku komórek docelowych (bakteryjnych, grzybiczych), ale również może być związana z ich działaniem toksycznym np. w kierunku komórek ludzkich np. skóry. Zagadnienia te wymagają zbadania, a następnie analizy bezpieczeństwa stosowania PDMAEMA przed rozważeniem jego szerszego zastosowania.

Celem przedstawionych badań była ocena potencjalnej toksyczności polikationów PDMAEMA o różnej masie cząsteczkowej, na podstawie wyników eksperymentów w modelowych układach lipidowych imitujących błony komórek ludzkiej skóry (keratynocytów i fibroblastów) oraz testów cytotoksyczności na liniach komórkowych HaCaT oraz WS1. Zbadany został wpływ dwóch polikationów na modelowe błony biologiczne tzn. monowarstwy lipidowe zawierające: cholesterol (Chol), fosfatydylocholinę (SOPC), sfingomielinę (SM) oraz ceramid (Cer17; Cer22). Zawartość ceramidów (lipidów charakterystycznych dla komórek skóry) w modelach wynosiła 20 mol%, przy stałej proporcji pozostałych składników (Chol:SOPC:SM = 1:2:0,3).[3] Wykonane zostały pomiary izoterm ciśnienia powierzchniowego w funkcji średniej powierzchni na cząsteczkę dla układów na buforze i na roztworach badanych polikationów o różnych stężeniach oraz badania inkorporacji polikationów do monowarstw. Wpływ badanych polikationów na przeżywalność komórek oceniono na liniach HaCaT i WS1 z wykorzystaniem metody barwienia fioletem krystalicznym.

Porównanie wyników uzyskanych w badaniach na monowarstwach Langmuira oraz na liniach komórkowych pozwoliło ocenić wpływ masy cząsteczkowej PDMAEMA na jego oddziaływanie z modelowymi błonami biologicznymi oraz cytotoksyczność względem komórek ludzkiej skóry. Uzyskane wyniki wskazują, że mechanizm działania PDMAEMA może być bardziej złożony i nie ograniczać się wyłącznie do bezpośredniego oddziaływania polimeru z błoną komórkową. Otrzymane rezultaty przyczyniają się do poszerzenia wiedzy na temat mechanizmów oddziaływania PDMAEMA z układami biologicznymi. Jednocześnie wskazują na możliwość wykorzystania badanych polimerów jako potencjalnych środków przeciwwgrzybiczych, łączących aktywność biocydyczną z ograniczonym wpływem na komórki ludzkiej skóry.



S10 PS05

Aktywność przeciwutleniająca ekstraktów z wybranych grzybów jadalnych wyznaczona metodami spektrofotometrycznymi i elektrochemicznymi.

Kacper Górski, Danuta Zielińska

Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie, Wydział Rolnictwa i Leśnictwa, Katedra Chemii,
Plac Łódzki 4, 10-721 Olsztyn
kacper.gorski@uwm.edu.pl

Grzyby jadalne od lat cieszą się rosnącym zainteresowaniem jako cenne źródło naturalnych związków bioaktywnych, wykazujących m.in. działanie przeciwutleniające, przeciwzapalne i przeciwnowotworowe. Są one istotnym źródłem naturalnych antyoksydantów, takich jak związki fenolowe, flawonoidy, witaminy (C, E) oraz ergotioneina i glutation, które neutralizują wolne rodniki i chronią komórki przed stresem oksydacyjnym. Antyoksydanty zawarte w grzybach kształtują ich pojemność antyoksydacyjną, która może stanowić istotny wyróżnik ich aktywności funkcjonalnej.

Celem badań było wyznaczenie i porównanie pojemności przeciwutleniającej owocników grzybów jadalnych. Materiałem do badań były 50% etanolowe ekstrakty grzybów: (1) z rodzaju *Pleurotus* – *P. ostreatus*, *P. djamor* i *P. populinus*; (2) z rodzaju *Ganodermataceae* – *G. multipileum* i *G. sinense*; oraz (3) z rodzaju *Hericium* – *H. erinaceus*. Ostatni gatunek uprawiany był na trzech zróżnicowanych podłożach hodowlanych: (a) trocinach drzew liściastych z dodatkiem łuski z ziaren palonej kawy, (b) trocinach bukowych z łuską sojową oraz (c) na ziarnach żyta z upraw ekologicznych. Zastosowanie różnego podłoża pozwoliło na ocenę wpływu substratu uprawnego na pojemność przeciwutleniającą soplówki jeżowatej.

Pojemność antyoksydacyjną badanych grzybów wyznaczono z zastosowaniem spektrofotometrycznych metod: na zasadzie neutralizacji rodnika DPPH[•], określając zdolność do redukcji jonów żelaza (III) (FRAP), oraz metodą elektrochemiczną (cykliczna voltamperometria; CV). Wykazano, że badane gatunki grzybów odznaczają się zróżnicowaną aktywnością przeciwutleniającą. Mieściła się ona w zakresie 13,9-18,9 $\mu\text{mol TE/g s.m.}$ w teście FRAP; 6,6-10,5 $\mu\text{mol TE/g s.m.}$ w teście DPPH oraz 0,06-5,6 $\mu\text{mol TE/g s.m.}$ z zastosowaniem metody CV. Najsilniejszą aktywnością charakteryzowały się ekstrakty z *P. ostreatus*, *P. djamor* oraz *H. erinaceus* uprawianej na ziarnach żyta. Z kolei ekstrakty z *G. multipileum* z rodzaju *Ganodermataceae* wykazały najmniejszą aktywność przeciwutleniającą. Badania wykazały także zróżnicowany wpływ zastosowanego podłoża do uprawy na pojemność przeciwutleniającą *H. erinaceus*.

Stwierdzono dodatnią korelację pomiędzy wartościami pojemności przeciwutleniającej grzybów wyznaczoną metodą elektrochemiczną (CV) z wartościami uzyskanymi metodami spektrofotometrycznymi (FRAP i DPPH), odpowiednio $r = 0,93$ oraz $r = 0,65$.



S10 PS06

Oznaczanie witamin A i E w różnych matrycach żywnościowych

Katarzyna Belka, Karolina Jelonkiewicz, Izabela Narloch

*Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej,
Zakład Analityki Żywności i Ochrony Środowiska*

izabela.narloch@pbs.edu.pl

Witaminy rozpuszczalne w tłuszczach odgrywają istotną rolę w utrzymaniu prawidłowego funkcjonowania organizmu, a ich zawartość w żywności i paszach stanowi ważny wskaźnik wartości odżywczej oraz jakości produktów. Oznaczanie retinolu, β -karotenu i α -tokoferolu jest niezbędne zarówno do weryfikacji zgodności z deklarowaną zawartością, jak i do monitorowania zmian zachodzących podczas procesów technologicznych i przechowywania. Jednoczesne oznaczanie tych związków w materiałach o zróżnicowanej matrycy analitycznej stanowi jednak istotne wyzwanie ze względu na ich właściwości fizykochemiczne oraz złożoność badanych próbek. Z tego względu ich oznaczanie wymaga zastosowania czułych, selektywnych i wiarygodnych metod analitycznych.

Celem pracy było opracowanie uniwersalnej procedury analitycznej umożliwiającej jednoczesne oznaczanie retinolu, β -karotenu oraz α -tokoferolu w różnorodnych matrycach żywnościowych i paszowych. W ramach badań podjęto próbę opracowania skutecznej procedury przygotowania próbek, pozwalającej na izolację badanych związków z materiałów o zróżnicowanych właściwościach fizykochemicznych oraz zapewnienie wiarygodności uzyskiwanych wyników analitycznych. Istotnym aspektem pracy było również dostosowanie opracowanej metody do założeń Zielonej Chemii Analitycznej poprzez ograniczenie zużycia rozpuszczalników organicznych oraz zmniejszenie ilości generowanych odpadów.

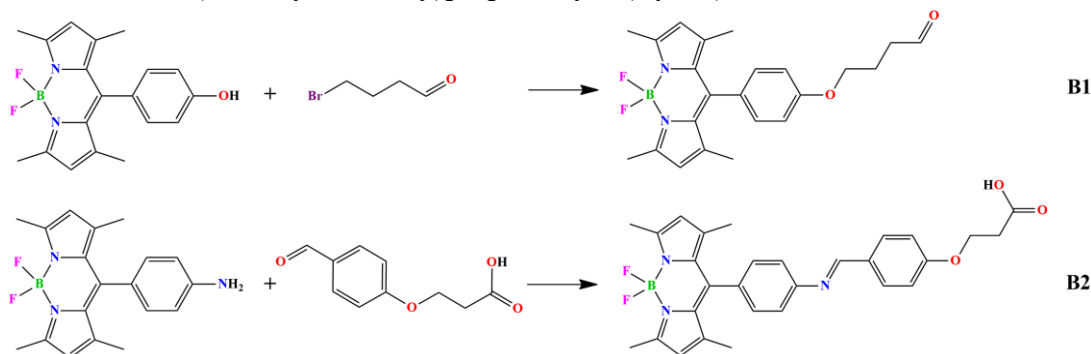
Opracowana metoda wykazała odpowiednią precyzję i powtarzalność, zapewniając wiarygodność uzyskiwanych wyników analitycznych. Przeprowadzona walidacja oraz analiza próbek rzeczywistych potwierdziły przydatność procedury do jednoczesnego oznaczania badanych związków w materiałach o złożonym i zróżnicowanym składzie matrycy.

Synteza borodipirrometenowych wielofunkcyjnych znaczników fluorescencyjnych

Adam Stańczak, Ewelina Wieczorek-Szweda, Izabela Pospieszna-Markiewicz

Wydział Chemii, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Poznań
 adasta7@st.amu.edu.pl

Do jednych z najpoważniejszych chorób zagrażających życiu i zdrowiu należą nowotwory. Współczesne metody leczenia polegają na chemioterapii oraz radioterapii, jednak stosowanie tych metod wiąże się często z wysoką inwazyjnością, wyniszczeniem organizmu, a także w wielu przypadkach nawrotem choroby [1]. Jedną z obiecujących metod leczenia jest obrazowanie medyczne. Polega na stosowaniu biomarkerów obrazowych umożliwiających identyfikację obecności nowotworów, a także ich stadium i agresywność. Obrazowanie medyczne odgrywa istotną rolę w procesie wczesnej diagnostyki nowotworów oraz monitorowania przebiegu terapii [2]. Szczególnym zainteresowaniem w obrazowaniu medycznym cieszą się BODIPY (związki złożone z rdzenia dipirrometenu skompleksowanego przez atom boru) jako biomarkery. Właściwości związków sprawiają, że są one idealnymi biomarkerami w obszarze obrazowania medycznego ze względu na ich unikalne właściwości fluorescencyjne oraz fotostabilność [3]. Celem badań było zaprojektowanie oraz synteza nowych związków wykazujących obiecujący potencjał w zakresie obrazowania medycznego jako znaczniki fluorescencyjne typu BODIPY (B1; B2) poprzez syntezę 4,4-difluoro-8-(4'-hydroksyfenylo)-1,3,5,7-tetrametylo-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacenu z 4-bromobutanalem oraz 4,4-difluoro-8-(4'-aminofenylo)-1,3,5,7-tetrametylo-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacenu z kwasem 3-(4-formylofenoksy)propanowym (Rys. 1).



Rysunek 1. Schemat reakcji otrzymywania B1; B2

Do charakterystyki otrzymanych związków wykorzystano techniki spektroskopii magnetycznego rezonansu jądowego (^1H NMR), spektroskopii w podczerwieni (FT-IR), spektrometrii mas (ESI-MS) oraz dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego (XRD) [4].

Podziękowania:

Projekt został zrealizowany dzięki wsparciu finansowemu w ramach „Study@research” nr 212/64/UAM/0007, finansowanego z programu Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza (ID-UB).

Bibliografia:

- [1] Siegel R. L.; Giaquinto A. N.; Jemal A. Cancer statistics, **2024**, CA: A Cancer Journal for Clinicians. 2024, 74(1), 12-49
- [2] Chen D.; Zhang T.; Dong X.; Mou X. BODIPY-based nanomedicine for cancer imaging and phototherapy. Colloids and Interface Science Communications. **2024**, art. 100816
- [3] Das S.; Dey S.; Patra S.; Bera A.; Ghosh T.; Prasad B.; Sayala K. D.; Maji K.; Bedi A.; Debnath S. BODIPY-Based Molecules for Biomedical Applications. Biomolecules. **2023**, 13(12), 1723
- [4] Qi Y.; Geib T.; Huynh A.-M.; Jung G.; Volmer D. A. Fragmentation patterns of boron-dipyrromethene (BODIPY) dyes by electrospray ionization high-resolution tandem mass spectrometry. Rapid Communications in Mass Spectrometry. **2015**, 29, 885–890.

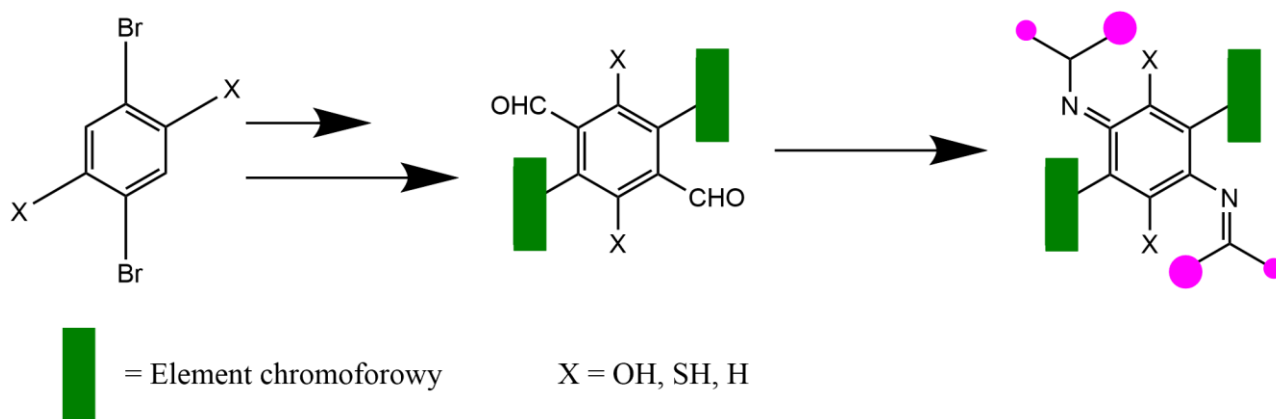
Jedna cząsteczka, wiele możliwości - nowa stereodynamiczna sonda chromoforowa do wysokoprzepustowej analizy amin pierwszorzędowych

Igor Jankowski¹, Hanna Bączek¹, Marcin Kwit¹

¹Wydział Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu;
ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań;
igojan@st.amu.edu.pl

Chiralność jest jednym z najbardziej fascynujących zjawisk występujących w naturze. Konfiguracja absolutna aminokwasów czy specyficzność substratowa receptorów i enzymów to jedne z wielu przykładów wpływu chiralności na powstanie życia na Ziemi. Makroskopowym efektem chiralności mikroświata jest aktywność optyczna, przejawiająca się m.in. skręcalnością optyczną oraz dichroizmem kołowym (CD) substancji. Spektroskopię dichroizmu kołowego można wykorzystać do określania konfiguracji absolutnej cząsteczek, o ile w cząsteczce znajduje się odpowiedni chromofor. W przypadku związków enancjomerycznie czystych, ale pozbawionych chromofora, badania stereochemiczne są możliwe, gdy do cząsteczki dołączona zostanie tzw. sonda chromoforowa. Sondy chromoforowe to cząsteczki achiralne, z reguły o dużej swobodzie konformacyjnej, adaptujące się do chiralnego otoczenia, stając się tym samym optycznie aktywne w spektroskopii CD^[1,2].

Celem tego projektu było zaprojektowanie i otrzymanie łatwej w zastosowaniu sondy chromoforowej, pochodnej aldehydu 2,5-dihydroksytereftalowego, podstawionego w pozycjach 3 i 6 odpowiednimi fragmentami aromatycznymi (i analogów tego związku). Taka sonda umożliwiłaby wysokoprzepustowe badania strukturalne amin pierwszorzędowych. Sonda charakteryzuje się budową modułową: grupy aldehydowe umożliwiają tworzenie wiązań z aminą, a grupy hydroksylowe przyspieszają reakcję iminowania i stabilizują cząsteczkę poprzez wewnątrzcząsteczkowe wiązania wodorowe.



Schemat 1. Budowa i mechanizm działania sondy chromoforowej

Projekt realizowany z funduszu przyznanego przez Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza, wniosek nr 200/39/UAM/0006.

¹ J. Ściebura, J. Gawroński, *Optical activity and helicity enhancement of diphenylmethyl molecular propellers. Tetrahedron: Asymmetry* **2013**, 24 (11), 683

² T. Mądry, A. Czapik, M. Kwit, *Optical Activity and Helicity Enhancement of Highly Sensitive Dinaphthylmethane Based Stereodynamic Probes for Secondary Alcohols; ACS Omega* **2019**, 4, 3244

Detekcja chiralności przy użyciu stereodynamicznych sond chromoforowych – wybrane przykłady

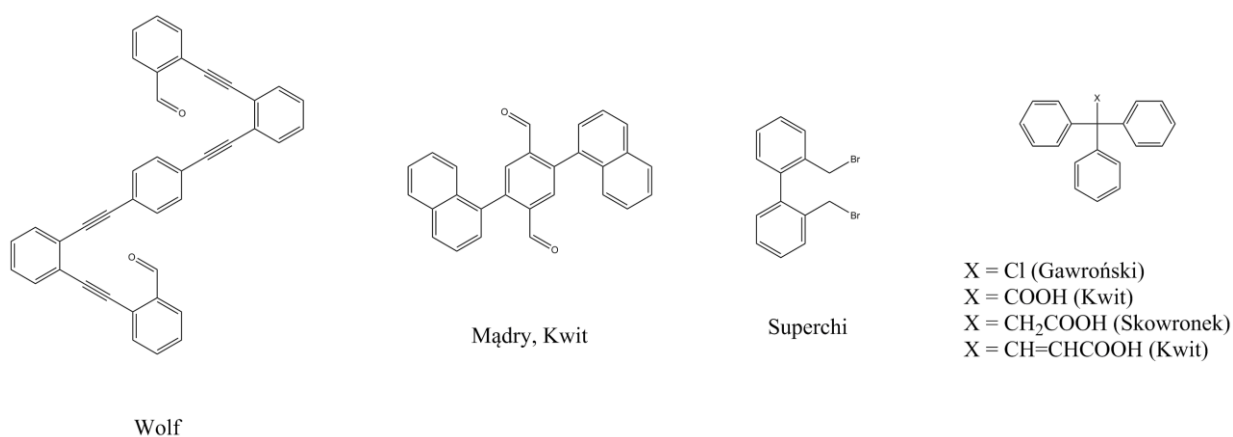
Hanna Bączek¹, Igor Jankowski¹, Marcin Kwit¹

¹Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii,
 ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań
 hanbac2@st.amu.edu.pl

Analiza związków chiralnych jest niezbędna wszędzie tam, gdzie różnice w strukturze trójwymiarowej decydują o możliwości ich dalszego wykorzystania, np. jako leków lub katalizatorów. W celu jakościowego określenia struktury cząsteczki chiralnej stosowane są rentgenografia strukturalna lub techniki chiralooptyczne, z których jedną z najskuteczniejszych jest elektronowy dichroizm kołowy (ECD). Metody spektroskopowe oparte na dichroizmie kołowym wymagają jednak obecności odpowiedniego chromoforu bądź chromoforów w strukturze badanych cząsteczek. Pomiar widm ECD z wykorzystaniem stereodynamicznych sond chromoforowych pozostaje jednym z rozwiązań problemu braku odpowiedniego chromoforu w cząsteczkach związku chiralnego.

Kowalencyjne bądź niekowalencyjne związanie chiralnej cząsteczki o szczątkowym widmie ECD (induktora) z widzialnym w zakresie promieniowania UV-Vis układem chromoforowym (sondą chromoforową) prowadzi do uzyskania złożonego widma ECD aktywnego w danym obszarze widmowym^{1,2}.

Niniejsza praca skupia się na przeglądzie literatury poświęconej nowym sondom chromoforowym i ich zastosowaniom, ze szczególnym uwzględnieniem sond opartych na pochodnych di- i triarylometylowych oraz bifenylu i jego kongenerach (Rys. 1).



Rys. 1. Struktury przykładowych sond chromoforowych.

Projekt realizowany z funduszu przyznanego przez Inicjatywa Doskonałości – Uczelnia Badawcza, wniosek nr 200/39/UAM/0006

¹ Mądry, T.; Gajewy, J.; Kwit, M. Dynamic Point-to-Helical and Point-to-Axial Chirality Transmission and Induction of Optical Activity in Multichromophoric Systems: Basic Principles and Relevant Applications in Chirality Sensing. *Symmetry* **2025**, *17*, 293.

² Wolf, Ch.; Bentley, K. W. Chirality sensing using stereodynamic probes with distinct electronic circular dichroism output. *Chem. Soc. Rev.* **2013**, *42* (12), 5408.

Addukty *N*-heterocyklicznych karbenów i fosfinidenów

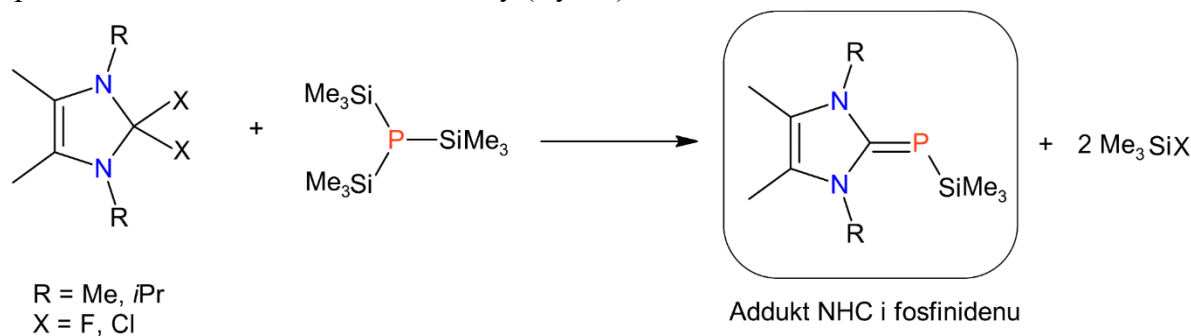
Paweł Ruczyński, Rafał Grubba, Kinga Kaniewska-Laskowska

Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny i Centrum Materialów Przyszłości, Politechnika Gdańska, ul. Gabriela Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk
 s196503@student.pg.edu.pl

Addukty *N*-heterocyklicznych karbenów i fosfinidenów mogą być postrzegane jako fosfaalkeny o odwróconej polaryzacji. Ze względu na obecność wolnej pary elektronowej oraz cząstkowego ładunku ujemnego na atomie fosforu addukty te wykazują właściwości nukleofilowe, a niska liczba koordynacyjna fosforu sprawia, iż są to związki wysoce reaktywne ulegające reakcjom addycji i substytucji z udziałem związków organicznych, związków pierwiastków grup głównych oraz kompleksów metali grup przejściowych, a także reakcjom utleniania. Dzięki swoim właściwościom addukty NHC i fosfinidenów znajdują szerokie zastosowanie w syntezie. Na szczególną uwagę zasługuje zastosowanie adduktów do aktywacji małych cząsteczek oraz potencjalnie jako prekursorzy do syntezy związków o właściwościach sfrustrowanych par Lewisa (FLP) oraz materiałów takich jak fosforek boru [1].

Synteza adduktów *N*-heterocyklicznych karbenów i fosfinidenów polega na reakcji odpowiedniego karbenu lub prekursora karbenu z odpowiednim związkiem będącym źródłem fosforu. Znanych jest wiele metod syntezy adduktów NHC i fosfinidenów, jednak znaczna większość z nich wymaga dużych objętościowo podstawników stabilizujących cząsteczkę kinetycznie [1].

Celem przeprowadzonych badań była eksperymentalna weryfikacja przydatności tych metod do syntezy adduktów posiadających małe objętościowo podstawniki na atomach azotu i fosforu. Przeprowadzone doświadczenia wykazały, że większość znanych metod nie jest skuteczna między innymi ze względu na polimeryzację adduktów. Na podstawie przeprowadzonych badań wstępnych można wysnuć wniosek, że najbardziej obiecujące są procedury wykorzystujące fluoro- i chloropochodne NHC oraz silylowane fosfiny (Rys. 1).



Rys. 1. Synteza adduktu NHC i fosfinidenu

Podziękowanie: Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki, w ramach projektu nr 2024/55/D/ST4/01606.

Literatura:

1. Krachko T, Slootweg JC, *European Journal of Inorganic Chemistry*, **2018**, 2018(24), 2734–2754.

Kationowe boraalkeny stabilizowane *N*-heterocyklicznymi karbenami

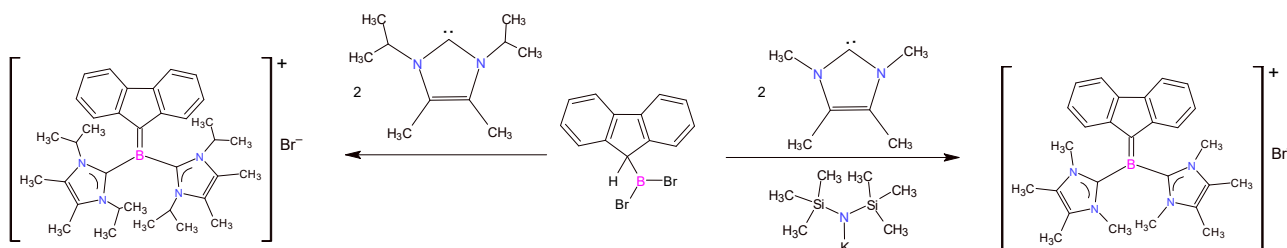
Wiktoria Piwecka, Rafał Grubba, Paweł Ruczyński, Antoni Czaplewski, Anna Ordyszewska-Lach, Wiktoria Błaszkwicz, Jarosław Chojnacki, Kinga Kaniewska-Laskowska

Katedra Chemii Nieorganicznej, Wydział Chemiczny i Centrum Materialów Przyszłości, Politechnika Gdańska, ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk, s193780@student.pg.edu.pl

Wiązanie i funkcjonalizacja małych cząsteczek, takich jak wodór czy ditlenek węgla, odgrywają kluczową rolę zarówno w przyrodzie, jak i w przemyśle, stanowiąc jednocześnie wyzwanie w kontekście walki ze zmianami klimatycznymi. Choć obecna kataliza zdominowana jest przez kompleksy metali przejściowych, zastąpienie ich związkami boru byłoby wysoce korzystne. Wynika to z niższej ceny reagentów borowych oraz lepszej dostępności pierwiastków grup głównych.

W tym kontekście wysoki potencjał jako aktywatory małych cząsteczek oraz katalizatory niemetaliczne wykazują boraalkeny. Obecność spolaryzowanego podwójnego wiązania węgiel–bor ($B=C$) nadaje tym układom charakter ambifilowy. Występowanie w obrębie tego wiązania centrum zasadowego (atom C) i kwasowego (atom B) Lewisa sprawia, że boraalkeny mogą naśladować reaktywność metali przejściowych, a w niektórych przypadkach również sfrustrowanych par Lewisa (FLP)¹.

Ponieważ boraalkeny są układami wysoce reaktywnymi, do ich syntezy oraz stabilizacji zastosowaliśmy *N*-heterocykliczne karbeny. Pełnią one podwójną rolę: działają jako odczynnik deprotonujący wobec substratu borowego, a następnie jako silnie σ -donorowe ligandy stabilizujące powstały produkt (Rys. 1). Warto podkreślić, że kationowa struktura otrzymanych boraalkenów nie była dotąd opisywana w literaturze. Prekursor, z którego je otrzymano, reaguje ze związkami platyny(0), prowadząc do powstania kompleksu platyny z ligandem boraalkenowym. Spodziewamy się, że otrzymane boraalkeny będzie można wykorzystać do syntezy związków boracyklicznych w reakcjach cykloaddycji z alkenami, fosfaalkenami oraz fosfanylofosfaalkenami. Ponadto, związki te mogą również służyć do otrzymywania materiałów opartych na fosforku boru.



Rys. 1. Synteza kationowych boraalkenów.

Podziękowanie: Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu nr 2024/55/D/ST4/01606.

¹ P. Paetzold, U. Englert, R. Finger, T. Schmitz, A. Tapper and R. Ziembinski, *Zeitschrift anorg allge chemie*, 2004, **630**, 508–518.

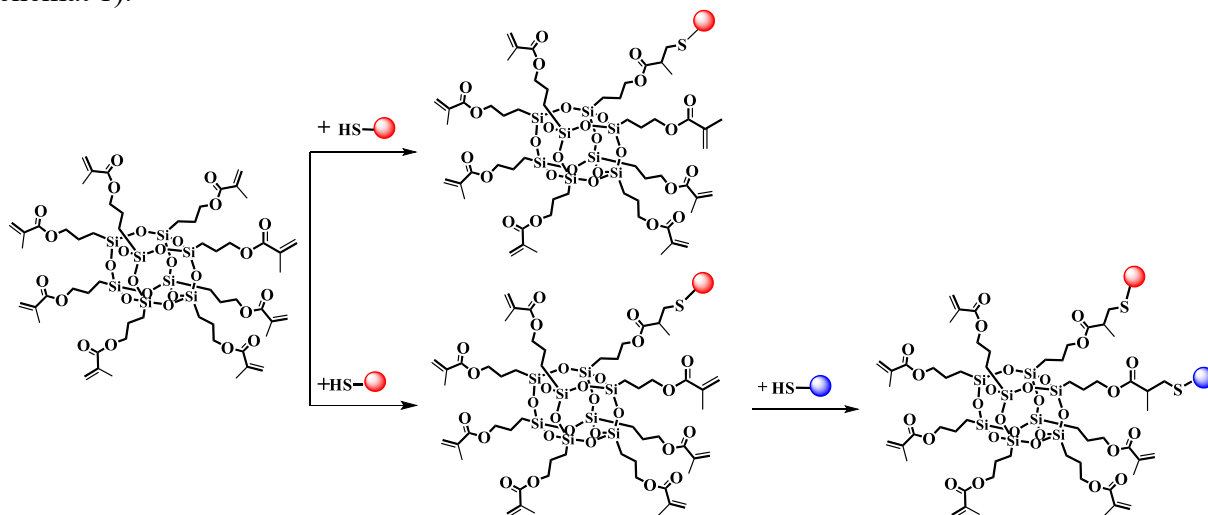
Nowa strategia syntezy sulfenyloowanych silseskwioksanów karbonylowych

Agata Duch, Oliwia Dudkiewicz, Antonina Drosińska, Kamil Hanek, Patrycja Żak

Zakład Chemii Metaloorganicznej, Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu
 ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, Poznań, 61-614, Polska
 agaduc@st.amu.edu.pl

W ostatnich latach obserwuje się rosnące zainteresowanie nowymi metodami syntezy zgodnymi z zasadami zielonej chemii, co wynika z potrzeby ograniczenia negatywnego wpływu procesów chemicznych na środowisko.¹ Nienasycone związki karbonylowe stanowią istotną klasę związków organicznych ze względu na obecność sprzężonego układu karbonylowego oraz wiązania podwójnego C=C, co determinuje ich wysoką reaktywność i szerokie spektrum zastosowań, m.in. w syntezie leków oraz jako prekursorów materiałów funkcjonalnych.² Aktualnie stosowane metody otrzymywania sulfenyloowanych związków karbonylowych często wymagają użycia dużych ilości katalizatorów, długich czasów reakcji oraz toksycznych rozpuszczalników organicznych.^{3, 4} Dodatkowo procesy te charakteryzują się ograniczoną selektywnością,⁵ co przekłada się na obniżenie wydajności oraz wzrost kosztów syntezy.

W komunikacie zostanie przedstawiona innowacyjna metoda syntezy nowej klasy sulfenyloowanych nanomateriałów karbonylowych (SQ-CO-S), charakteryzujących się wysoką odpornością termiczną i korzystnymi właściwościami mechanicznymi. Opracowane układy zostaną otrzymane na drodze organokatalitycznej addycji tioli do metakrylo- i akrylopodstawionych silseskwioksanów klatkowych (SQ), umożliwiającą syntezę zarówno pochodnych monofunkcyjnych, jak i symetrycznych oraz niesymetrycznych pochodnych multifunkcyjnych (Schemat 1).



Schemat 1. Funkcjonalizacja oktametakrylopodstawionego SQ

Literatura:

- Yadav, S.; Singh, G.; Mishra, S.; Prajapati, H. C.; Chauhan, D. S.; Quraishi, M. A., *Sustain. Chem. One World* **2026**, 10, 100228.
- Zhang, S.; Neumann, H.; Beller, M., *Chem. Soc. Rev.* **2020**, 49 (10), 3187–3210.
- Margalef, J.; Samec, J. S. M., *ChemSusChem* **2021**, 14 (3), 808–823.
- Roth, H. G.; Romero, N. A.; Nicewicz, D. A., *Synlett* **2016**, 27 (5), 714–723.
- Enders, D.; Lüttgen, K.; Narine, A. A., *Synthesis* **2007**, 7, 959–980.

Badania finansowane przez ID-UB, projekt nr 201/34/UAM/0005.



S10 PS13

Nowe, aktywne w świetle widzialnym fotoinicjatory polimeryzacji rodnikowej i kationowej na bazie halogenowanych pochodnych tiofenu na potrzeby druku 3D

Michał Sula¹; Filip Petko¹; Andrzej Świeży¹; Joanna Ortyl^{1,2,3}

1 Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki, Wydział Inżynierii i Technologii Chemicznej, Warszawska 24, 31-155 Kraków, Polska

2 Photo HiTech Sp. z o.o., Bobrzyńskiego 14, 30-348 Kraków, Polska

*3 Photo4Chem Sp. z o.o., Juliusza Lea 114 / 416A, 416B, 30-133 Kraków, Polska
michal.sula@student.pk.edu.pl*

Rozwój technologii fotopolimeryzacji w kadzi (VPP), takich jak druku SLA czy DLP, generuje zapotrzebowanie na nowe układy fotoinicjujące aktywne w paśmie emisji energooszczędnych źródeł światła typu LED. Zmiany regulacyjne dotyczące wycofywania toksycznych inicjatorów komercyjnych (np. TPO) oraz brak absorpcji samych komercyjnie dostępnych soli jodoniowych w zakresie widzialnym wymuszają poszukiwanie wydajnych fotosensybilizatorów. Pochodne tiofenu stanowią wartościową grupę chromoforów o silnych właściwościach fotoredukcyjnych. Wprowadzenie atomów halogenów do struktury pierścienia tiofenowego umożliwia nie tylko modyfikację właściwości elektrochemicznych i przesunięcie pasma absorpcji ku dłuższym falom, ale także wykorzystanie efektu ciężkiego atomu do zwiększenia wydajności przejścia międzysystemowego (cząsteczki fotosensybilizatora wydajniej osiągają stan trypletowy).^{1,2}

W ramach pracy zsyntezowano serię nowych halogenowanych pochodnych tiofenu oraz oceniono ich przydatność jako sensybilizatorów w układach inicjujących fotopolimeryzację rodnikową monomerów akrylanowych oraz kationową monomerów epoksydowych. Właściwości fotofizyczne i mechanizmy przeniesienia elektronu przeanalizowano z wykorzystaniem spektroskopii UV-Vis oraz woltamperometrii cyklicznej. Kinetykę fotopolimeryzacji pod wpływem promieniowania LED o długości fali 405 nm monitorowano w czasie rzeczywistym techniką RT-FTIR, wyznaczając szybkość reakcji oraz końcowy stopień konwersji wiązań podwójnych i grup epoksydowych w obecności soli jodoniowych oraz koinicjatorów aminowych.

Otrzymane związki wykazały wysokie wartości molowego współczynnika absorpcji w obszarze 400–420 nm oraz dużą wydajność kwantową generowania centrów aktywnych. Pomiary RT-FTIR potwierdziły szybki przebieg fotopolimeryzacji rodnikowej i kationowej z osiągnięciem znacznych stopni przereagowania. Praktyczna weryfikacja opracowanych żywic w druku 3D pozwoliła na otrzymanie trójwymiarowych obiektów o wysokiej rozdzielczości optycznej i wiernym odwzorowaniu geometrii. Wyniki wskazują, że halogenowane pochodne tiofenu stanowią wydajną i uniwersalną alternatywę dla konwencjonalnych fotoinicjatorów UV w zaawansowanych technologiach druku 3D.

Podziękowanie: Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Badań i Rozwoju w ramach projektu LIDER pod tytułem: “Nowe innowacyjne kompozytowe materiały konstrukcyjno-naprawcze utwardzane na drodze wysoce energooszczędnej fotoindukowanej polimeryzacji frontalnej”, numer projektu: LIDER15/0374/2024.

[1] M. Topa, E. Hola, M. Galek, F. Petko, M. Pilch, R. Popielarz, F. Morlet-Savary, B. Graff, J. Laleveé and J. Ortyl, *Polym. Chem.*, 2020, 11, 5261–5278.

[2] W. Tomal, D. Krok, A. Chachaj-Brekiesz, P. Lepcio and J. Ortyl, *Addit. Manuf.*, 2021, 48, 102447

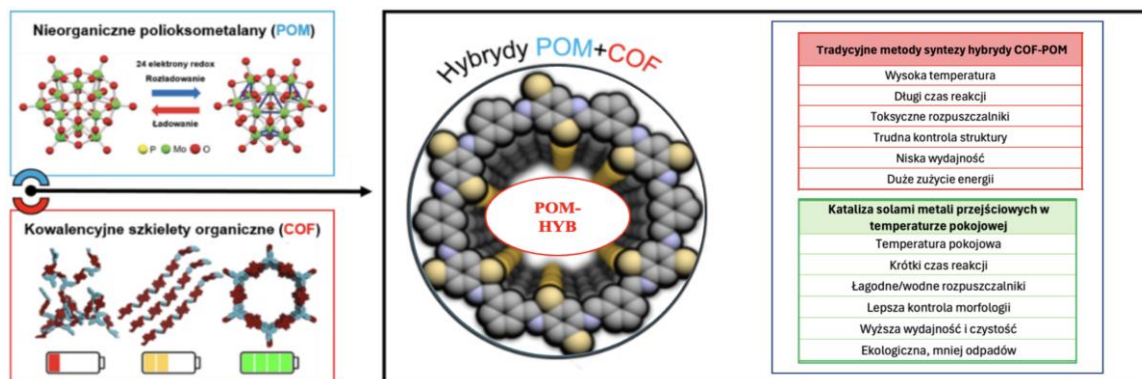
Synteza elektrochemicznie aktywnych materiałów hybrydowych w łagodnych warunkach z wykorzystaniem łatwo dostępnych soli metali przejściowych

Ahata Piatrutsik, Dawid Marcinkowski, Aleksandra Sikora, Adam Gorczyński

Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Wydział Chemii ;
ul. Wieniawskiego 1, 61-712 Poznań;
ahapia@st.amu.edu.pl

Kowalencyjne szkielety organiczne (COF, *covalent organic frameworks*) stanowią klasę krystalicznych, porowatych polimerów o wysokim stopniu uporządkowania strukturalnego, dużej powierzchni właściwej oraz modularności, co czyni je obiecującymi materiałami m.in. w katalizie, separacji cząsteczek i magazynowaniu energii.^[1] Równolegle intensywnie rozwijane są badania nad polioksometalami (POM) - anionowymi klastrami tlenków metali przejściowych, które wyróżniają się dobrymi właściwościami redox-aktywnymi w szerokim zakresie pH, wysoką stabilnością i możliwością modyfikacji strukturalnej.^[2] Integracja jednostek POM z sieciami COF umożliwia projektowanie materiałów hybrydowych łączących rozwiniętą porowatość z aktywnością elektrochemiczną. Jednak dotychczasowe metody syntezy takich układów wymagają zazwyczaj wysokiej temperatury, długiego czasu reakcji oraz silnie kwasowych warunków.^[3-5]

Celem pracy jest opracowanie łagodnej i przyjaznej środowisku metody syntezy materiałów typu POM-COF z wykorzystaniem łatwo dostępnych soli metali przejściowych jako łagodnych kwasów Lewisa w roli katalizatora. Synteza oparta jest na reakcji kondensacji iminowej pomiędzy aminofunkcjonalizowanym polioksometalaniem a trójaldehydowym prekursorem organicznym, prowadzonej w warunkach pokojowych. Zastosowanie jonów metali przejściowych (Fe^{3+} , Ni^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+}) umożliwia aktywację grup karbonylowych i sprzyja efektywnemu tworzeniu wiązań iminowych bez konieczności stosowania agresywnych warunków reakcji.^[3]



W pracy analizowany jest wpływ parametrów syntezy, takich jak rodzaj katalizatora, skład układu reakcyjnego oraz czas prowadzenia reakcji, na stopień uporządkowania strukturalnego i rozwój porowatości otrzymanych materiałów. Otrzymane hybrydy POM-COF poddawane są charakterystyce fizykochemicznej w celu określenia zależności między warunkami syntezy a właściwościami materiałów.

Opracowana metoda stanowi efektywne podejście do otrzymywania elektrochemicznie aktywnych materiałów porowatych, które mogą znaleźć zastosowanie w nowoczesnych systemach magazynowania energii.

Literatura:

- [1] Åhlén, M.; Kong, X.; Zhao, W.; Zamora, F.; Xu, C. Overcoming Boundaries: Towards the Ambient Aqueous Synthesis of Covalent Organic Frameworks. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2025, 64, e202425426.
- [2] Pakulski, D.; Gorczyński, A.; Bryczyńska, D.; Montes-García, V.; Czepa, W.; Janica, I.; Bielejewski, M.; Kubicki, M.; Patroniak, V.; Samorí, P.; Ciesielski, A. New Anderson-Based Polyoxometalate Covalent Organic Frameworks as Electrodes for Energy Storage Boosted Through Keto-Enol Tautomerization. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2023, 62, e202305239.
- [3] Zhu, D.; Zhang, Z.; Alemany, L. B.; Li, Y.; Nnorom, N.; Barnes, M.; Khalil, S.; Rahman, M. M.; Ajayan, P. M.; Verduzco, R. Rapid, Ambient Temperature Synthesis of Imine Covalent Organic Frameworks Catalyzed by Transition-Metal Nitrates. *Chemistry of Materials*, 2021, 33(9), 3394–3400.
- [4] Geng, K.; He, T.; Liu, R.; Dalapati, S.; Tan, K. T.; Li, Z.; Tao, S.; Gong, Y.; Jiang, Q.; Jiang, D. Covalent Organic Frameworks: Design, Synthesis, and Functions. *Chem. Rev.* 2020, 120, 8814–8933.
- [5] Li, X.; Jia, Z.; Zhang, J.; Zou, Y.; Jiang, B.; Zhang, Y.; Shu, K.; Liu, N.; Li, Y.; Ma, L. Moderate and Universal Synthesis of Undoped Covalent Organic Framework Aerogels for Enhanced Iodine Uptake. *Chem. Mater.* 2022, 34, 10337–10346.



S10 PS15

Nanopręty W_xN/WO_x jako katalizator reakcji wydzielania wodoru

Magdalena Ligier^a, Kornelia Ciurzyńska^a, Mariusz Szkoda^a, Anna Ilnicka^b

^a Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska, Narutowicza 11/12 80-233 Gdańsk;

^b Wydział Chemiczny, Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu, Gagarina 7 87-100 Toruń;
s193143@student.pg.edu.pl

Przejście w kierunku zrównoważonej i niskoemisyjnej gospodarki energetycznej w dużym stopniu zależy od wydajnej produkcji zielonego wodoru poprzez elektrochemiczne rozszczepianie wody. Jednakże powszechne komercyjne wdrożenie tej technologii jest zasadniczo trudne z powodu powolnej kinetyki anodowej reakcji wydzielania tlenu oraz wysokich kosztów związanych z zaawansowanymi katalizatorami z metali szlachetnych, takimi jak platyna stosowana w reakcji wydzielania wodoru (HER). W związku z tym zaprojektowanie wysoce aktywnych, trwałych i opartych na pierwiastkach powszechnie występujących w naturze elektrokatalizatorów pozostaje jednym z najważniejszych wyzwań w dziedzinie nauki o materiałach dla energetyki. Azotki metali przejściowych (TMN) pojawiły się ostatnio jako wysoce atrakcyjna alternatywa ze względu na swoje unikalne właściwości fizykochemiczne. Wbudowanie atomów azotu w luki międzywęzłowe sieci krystalicznej metalu przejściowego powoduje zwężenie pasm d metalu, modulując gęstość stanów elektronowych w taki sposób, aby bardziej przypominała tę w metalach szlachetnych. Ta modyfikacja strukturalna zapewnia wysoką przewodność elektryczną, stabilność chemiczną i zwiększoną odporność na korozję, stanowiąc solidną podstawę do projektowania zaawansowanych katalizatorów. Ponadto azotki wolframu wyróżniają się wysoką stabilnością w silnie kwasowym jak i zasadowym środowisku elektrolitycznym oraz właściwościami katalitycznymi przypominającymi metale szlachetne.

W prezentowanych badaniach przedstawiamy nanopręty W_xN/WO_x jako katalizatory reakcji wydzielania wodoru zsyntezowane metodą *urea glass* [1], w której azotki powstają z prekursorów chlorkowych oraz mocznika jako źródła azotu. Charakterystyka strukturalna i morfologiczna uzyskanych produktów została potwierdzona wynikami dyfrakcji rentgenowskiej (XRD) oraz obrazami ze skaningowego mikroskopu elektronowego (SEM) wraz ze spektroskopią rentgenowską z dyspersją energii (EDX). Badania wykazały zależność proporcji mocznika do chlorku na skład uzyskanego produktu. Niższa zawartość mocznika skutkowałą produktem składającym się z dodatkowych faz węglików wolframu. Natomiast właściwości katalityczne zostały sprawdzone w pomiarach elektrochemicznych zarówno w środowisku kwasowym jak i zasadowym. Elektrody W_xN/WO_x wykazały niższe wartości nadpotencjału niż elektrody WO_3 oraz wykazały się większą stabilnością w warunkach elektrolizy.

Podziękowanie dla programu OPUS (Grant nr. UMO-2024/53/B/ST5/02770).

[1] C. Giordano, C. Erpen, W. Yao, i M. Antonietti, „Synthesis of Mo and W Carbide and Nitride Nanoparticles via a Simple “Urea Glass” Route”, *Nano Letters*, t. 8, nr 12, s. 4659–4663, grud. 2008, doi: [10.1021/NL8018593](https://doi.org/10.1021/NL8018593).



S10 PS16

Synteza i charakterystyka analogów błękitu pruskiego jako materiałów katodowych do ogniw sodowo-jonowych

Manuela Skowron, Ewelina Rudnicka, Maciej Galiński

Zakład Chemii Fizycznej, Instytut Chemii i Elektrochemii Technicznej, Wydział Technologii Chemicznej, Politechnika Poznańska, Berdychowo 4, Poznań

manuela.skowron@doctorate.put.poznan.pl

Dynamiczny rozwój elektromobilności oraz rosnący udział odnawialnych źródeł energii powodują wzrost zapotrzebowania na wydajne i zrównoważone systemy magazynowania energii. Obecnie dominującą technologię stanowią akumulatory litowo-jonowe, jednak ograniczona dostępność złóż litu, ich nierównomierne rozmieszczenie oraz rosnące koszty pozyskiwania tego surowca skłaniają do poszukiwania alternatywnych rozwiązań. Wśród nich szczególne zainteresowanie wzbudzają akumulatory sodowo-jonowe, które dzięki wysokiej dostępności sodu, jego niskim kosztom oraz podobnym właściwościom elektrochemicznym do litu stanowią perspektywiczną technologię magazynowania energii [1,2].

Jednym z głównych wyzwań ograniczających rozwój ogniw sodowo-jonowych pozostaje opracowanie materiałów katodowych zapewniających wysoką pojemność właściwą, dobrą stabilność podczas wielokrotnego cyklowania oraz możliwość otrzymywania prostymi i skalowalnymi metodami syntezy. Wśród najbardziej perspektywicznych materiałów znajdują się analogi błękitu pruskiego (PBA), które dzięki swojej otwartej strukturze krystalicznej umożliwiają sprawny transport jonów sodu, charakteryzują się wysoką stabilnością strukturalną oraz dużą swobodą modyfikacji składu chemicznego.

W niniejszej pracy otrzymano materiał na bazie analogu błękitu pruskiego z podwójnym domieszkowaniem metalami przejściowymi, wykorzystując prostą metodę współstrącania. W celu oceny właściwości otrzymanego materiału przeprowadzono badania strukturalne z zastosowaniem skaningowej mikroskopii elektronowej (SEM), spektroskopii dyspersji energii promieniowania rentgenowskiego (EDS) oraz dyfrakcji rentgenowskiej (XRD). Wyniki potwierdziły otrzymanie dobrze wykryształizowanej struktury PBA oraz jednorodne rozmieszczenie pierwiastków domieszkujących w obrębie sieci krystalicznej.

Właściwości elektrochemiczne materiału oceniono z wykorzystaniem woltamperometrii cyklicznej oraz pomiarów galwanostatycznego ładowania i wyładowania. Otrzymany materiał wykazał stabilną odpowiedź redoks, wysoką odwracalność procesów elektrochemicznych oraz korzystne parametry pracy jako materiał katodowy w ogniwach sodowo-jonowych. Zaobserwowano również dobrą stabilność podczas kolejnych cykli pracy.

Uzyskane wyniki potwierdzają, że domieszkowanie metalami przejściowymi stanowi skuteczną strategię modyfikacji analogów błękitu pruskiego i może przyczynić się do opracowania wydajnych materiałów katodowych dla nowej generacji akumulatorów sodowo-jonowych.

- [1] N. Kitchamsetti, A.L.F. de Barros, S. Mhin, Prussian Blue Analogs as Cathode Materials for Sodium-Ion Batteries, *Batter. Supercaps* (2025). <https://doi.org/10.1002/batt.202500482>.
- [2] Y. Xiao, J. Xiao, H. Zhao, J. Li, G. Zhang, D. Zhang, X. Guo, H. Gao, Y. Wang, J. Chen, G. Wang, H. Liu, Prussian Blue Analogues for Sodium-Ion Battery Cathodes: A Review of Mechanistic Insights, Current Challenges, and Future Pathways, *Small* 20 (2024). <https://doi.org/10.1002/sml.202401957>.

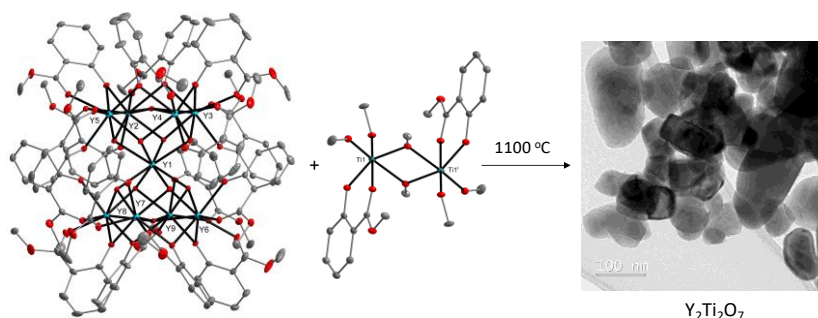
Opracowanie efektywnych metod immobilizacji modelowych odpadów promieniotwórczych poprzez ich wbudowanie w matryce krystaliczne otrzymywane z prekursorów molekularnych

Agata Dżaman, Rafał Petrus

*Wydział Chemiczny Politechniki Wrocławskiej, Smoluchowskiego 23, 50-370 Wrocław.
 271972@student.pwr.edu.pl*

Bezpieczne zagospodarowanie odpadów promieniotwórczych wymaga opracowania trwałych metod immobilizacji ich składników. Jednym z możliwych rozwiązań jest ich wprowadzenie do stabilnych matryc krystalicznych. Szczególnie interesujące w tym obszarze zastosowań są homo- i heterometaliczne związki grupy 4, a wśród nich zwłaszcza związki Ti^{IV} i Zr^{IV} , które stanowią komponenty szeregu naturalnie występujących minerałów. Oprócz powszechnie badanych w tym obszarze tlenków o strukturze perowskitu ABO_3 ($\text{A} = \text{Ca}^{\text{II}}, \text{Sr}^{\text{II}}, \text{Ba}^{\text{II}}$; $\text{B} = \text{Ti}^{\text{IV}}, \text{Zr}^{\text{IV}}, \text{Hf}^{\text{IV}}$), istnieją również materiały o strukturze pirochloru $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$ ($\text{A} = \text{RE}^{\text{III}}$; $\text{B} = \text{Ti}^{\text{IV}}, \text{Zr}^{\text{IV}}, \text{Hf}^{\text{IV}}$). Jednym z najlepiej poznanych syntetycznych przedstawicieli grupy pirochloru jest $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, który znajduje szereg zastosowań przemysłowych.¹

Głównym celem prezentowanych badań było opracowanie nowych, efektywnych i wysoce wydajnych metod immobilizacji modelowych odpadów promieniotwórczych poprzez ich wbudowanie i unieruchomienie na poziomie atomowym w matrycach krystalicznych o strukturze $\text{A}_2\text{B}_2\text{O}_7$.² Syntezę pirochlorów itru z metalami grupy 4 przeprowadzono z wykorzystaniem związków kompleksowych $[\text{Y}_9(\mu_4\text{-OH})_2(\mu_3\text{-OH})_8(\text{sal-Me})_{16}]\text{Cl}$ oraz $[\text{Ti}_2(\text{OMe})_6(\text{sal-Me})_2]$ lub $[\text{Zr}(\text{Hf})(\text{sal-Me})_4]$ jako prekursorów molekularnych, jak przedstawiono na Rysunku 1. $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ wykorzystano jako matrycę do immobilizacji wybranych jonów ziem rzadkich, które stanowiły mimetyki transuranowców. Zastąpienie jonów Ti^{IV} w strukturze $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ jonami Zr^{IV} lub Hf^{IV} umożliwiło opracowanie matryc o zwiększonej gęstości oraz potencjalnie wyższej odporności na uszkodzenia radiacyjne.



Rys. 1. Synteza matrycy $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ do immobilizacji modelowych odpadów radioaktywnych.

Podziękowania: Badania sfinansowano ze środków NCN w ramach projektu o nr 2023/49/B/ST4/04068.

1. M. Suganya and K. Ganesan and P. Vijayakumar and Amirdha Sher Gill and R. Ramaseshan, S. Ganesamoorthy, Scripta Materialia 2020, 187, 227.
2. N. Gumber, M. Shafeeq, S. K. Gupta, R. Phatak, U. K. Goutam, R. Kumar, R. V. Pai, Dalton Trans. 2023, 52, 14170.

Chemical recycling of post-consumer pet using heterometallic alkali- and alkaline earth/transition-metal aryloxides

Karolina Matuszak, Rafał Petrus

Wrocław University of Science and Technology, Faculty of Chemistry, 23 Smoluchowskiego, 50-370 Wrocław

karolina.matuszak@pwr.edu.pl

Poly(ethylene terephthalate) (PET) is the fourth most commonly used plastic, with primary applications in synthetic fiber manufacture (over 60%) and thermoforming, often in combination with engineering resins and glass fibers. The most common approach to recycle post-consumer PET is mechanical recycling, which is economically viable and involves sorting, cleaning, shredding, melting, and re-extruding plastic waste into pellets. This method performs well for specific waste streams, such as bottles or containers, and is suitable for producing durable materials for applications different from the original ones. However, mechanically recycled PET from trays is often affected by organic impurities and may contain multilayer material. Additional limitations include reduced molecular weight and yellowing caused by thermal degradation. An alternative approach is chemical depolymerization, which involves breaking polymer chains into monomers or intermediates via chemical reactions. The resulting molecules can then be reused to produce polymers of the same grade and quality. Industrially, PET is produced via the reaction of terephthalic acid (TAH₂) or dimethyl terephthalate (DMT) with ethylene glycol (EG), followed by direct polycondensation of the resulting bis(2-hydroxyethyl) terephthalate (BHET) and low-molecular-weight oligomers.

In this work, a series of homometallic alkali metal aryloxides: lithium, sodium, potassium, cesium and rubidium, and their heterometallic combinations with magnesium, calcium and zinc were investigated as catalysts for the chemical recycling of post-consumer poly(ethylene terephthalate) (Fig. 1).

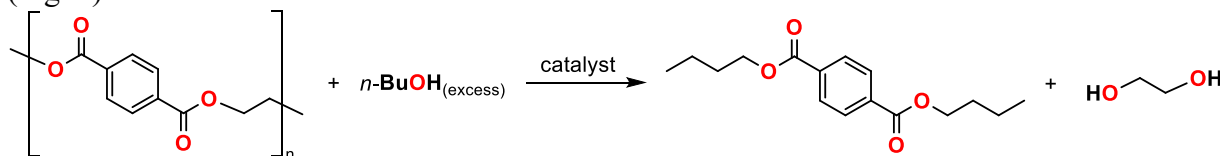


Figure 1. General route for the chemical recycling of PET.

The recovery of terephthalate monomer as the liquid diester dibutyl terephthalate (DBT) makes this approach economically attractive for the recycling of unsorted plastic waste streams. Among the compounds tested, the highest activity in PET butanolysis under mild conditions (150 °C) was observed for compounds [CaLi₆(sal-Me)₈] (99%), [Ca₂Li₂(sal-Me)₆(THF)₂] (93%), [ZnK₂(sal-Me)₄]_n (92%), and [ZnLi₂(sal-Me)₄(THF)₂] (90%).

References

- [1]. Guo, Z.; Wu, J.; Wang, J. Chemical degradation and recycling of polyethylene terephthalate (PET): a review. *RSC Sustain.* **2025**, 3 (5), 2111–2133.
- [2]. Sinha, V.; Patel, M. R.; Patel, J. V. Pet waste Management by Chemical Recycling: a review. *J. Environ. Polym. Degrad.* **2010**, 18 (1), 8–25.



Sesja posterowa Mistrz i Uczeń





MU 01

Magnetyczne nanonośniki chitozanowe funkcjonalizowane fragmentami VEGF jako inteligentne systemy dostarczania leku przeciwnowotworowego

Patrycja Grabarczyk, Beata Kolesińska

*Instytut Chemii Organicznej, Wydział Chemiczny, Politechnika Łódzka, Żeromskiego 116, 90-924 Łódź
patrycjagrabarczyk4@gmail.com*

Choroby nowotworowe stanowią jedno z najpoważniejszych wyzwań cywilizacyjnych, będąc globalnym problemem zdrowotnym, z którym stale mierzy się ludzkość. Główną barierą w klasycznej chemioterapii jest brak selektywności działania stosowanych substancji aktywnych, co nieuchronnie prowadzi do silnej toksyczności ogólnoustrojowej oraz poważnych uszkodzeń zdrowych tkanek [1]. Strategią pozwalającą na rozwiązanie tego problemu jest rozwój inteligentnych systemów dostarczania leków (DDS), w tym cząsteczek hybrydowych zawierających lek alkilujący – chlorambucyl [2]. Niska specyficzność tkankowa tradycyjnych form podania drastycznie ogranicza bezpieczną dawkę terapeutyczną oraz obniża ogólną efektywność leczenia [3]. Z myślą o optymalizacji indeksu terapeutycznego skonstruowano zintegrowany nanoukład o strukturze rdzeniowo-otoczkowej (*core-shell*), łączący terapię ukierunkowaną z lokalną hipertermią magnetyczną. Magnetyczny rdzeń z magnetytu (Fe_3O_4) pozwala na precyzyjne sterowanie nośnikiem za pomocą zewnętrznego pola magnetycznego oraz na generowanie ciepła pod wpływem fal radiowych, podczas gdy biogodna otoczka chitozanowa sieciowana tripolifosforanem sodu (TPP) zapewnia stabilizację strukturalną układu. Do aktywnego naprowadzania wykorzystano nadekspresję receptorów VEGFR w angiogenezie nowotworowej, funkcjonalizując powierzchnię nanocząstek peptydami naśladującymi sekwencję VEGF, co stanowi fundament współczesnych terapii celowanych [4].

W ramach części eksperymentalnej przeprowadzono syntezę koniugatów peptyd-lek na fazie stałej, wykorzystując triazynowe odczynniki kondensujące, a strukturę oraz czystość otrzymanych związków potwierdzono techniką LC-MS. W kolejnym etapie wytworzono nanonośniki magnetyczne, powlekając rdzeń chitozanem w NaOH i adsorbując ładunek. Planowana charakteryzacja obejmuje metody FTIR, DLS, TGA oraz oznaczenie EE% technikami HPLC i UV-Vis. Badania uwalniania leku w polu radiowym (RF) [6] zweryfikują, czy wzrost temperatury ($>46^\circ\text{C}$) indukuje rozluźnienie otoczki i wyrzut substancji aktywnej, łącząc efekt hipertermii z terapią alkilującą.

Uzyskane wyniki mogą zapoczątkować rozwój innowacyjnych strategii w obszarze medycyny precyzyjnej, istotnie zwiększając efektywność i bezpieczeństwo terapii przeciwnowotworowych.

Podziękowania: Praca została sfinansowana z Własnego Funduszu Stypendialnego Politechniki Łódzkiej (wsparcie dla Patrycji Grabarczyk). Serdecznie dziękujemy Pani dr hab. inż. Justynie Frączyk, Pani dr inż. Joannie Lewandowskiej oraz Panu dr Dariuszowi Zielińskiemu za pomoc i wsparcie w realizacji badań.

- [1] V. T. DeVita Jr., E. Chu, *Cancer Research*, **2008**, 68(21), 8643–8653.
- [2] S. Peter, B. A. Aderibigbe, *Molecules*, **2023**, 28(19), 6889.
- [3] R. Esmeh, P. Khani, A. Hosseini, J. Garssen, R. Falak, *Cancer Immunology, Immunotherapy*, **2022**, 71(3), 507–526.
- [4] P. Kocbek, N. Obermajer, M. Cegnar, J. Kos, J. Kristl, *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, **2007**, 67(1), 122–130.
- [5] Z. Su, D. Xiao, F. Xie, L. Liu, Y. Wang, S. Fan, X. Zhou, *Acta Pharmaceutica Sinica B*, **2023**, 13(9), 3612–3633.
- [6] R. Sheyi, B. G. de la Torre, K. Albericio, *Pharmaceutics*, **2022**, 14(4), 796.



MU 02

Nowe podejście do badania soczewek wewnątrzgałkowych pod kątem ich starzenia

Maciej Łuczak^{1*}, Katarzyna Witt-Kalicińska², Artur Kościuszko³

¹ Szkoła Doktorska, Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Al. prof. S. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz

² Wydział Technologii i Inżynierii Chemicznej, Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, ul. Seminaryjna 3, 85-326 Bydgoszcz

³ Wydział Inżynierii Mechanicznej, Politechnika Bydgoska im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, Al. prof. S. Kaliskiego 7, 85-796 Bydgoszcz

*e-mail: macluc003@pbs.edu.pl

Soczewki wewnątrzgałkowe (IOL) są implantami przeznaczonymi do wieloletniego funkcjonowania w środowisku przedniej komory oka. Pomimo postępu w projektowaniu i wytwarzaniu biomateriałów implanty mogą ulegać zmianom związanym ze starzeniem, takim jak glistening, kalcyfikacja, depozycja osadów białkowo-lipidowych oraz deformacje optyczne i mechaniczne. Zmiany te mogą ograniczać przezierność implantu, zwiększać rozpraszanie światła, pogarszać kontrast widzenia, a w zaawansowanych przypadkach prowadzić do konieczności eksplantacji. Obecne procedury przyspieszonego starzenia opierają się głównie na izotermicznym modelu Arrheniusa i założeniu $Q_{10}=2$. Podejście to nie uwzględnia jednak w wystarczającym stopniu zróżnicowania materiałowego soczewek ani złożonego charakteru środowiska wewnątrzgałkowego.

Celem planowanego projektu jest opracowanie zintegrowanego systemu oceny starzenia IOL, umożliwiającego bardziej realistyczną ocenę trwałości materiałowej i ryzyka późnych zmian klinicznych. Badania będą obejmowały porównanie soczewek hydrofilowych i hydrofobowych w warunkach przyspieszonego starzenia z uwzględnieniem środowiska bliższego składowi cieczy wodnistej, cykli temperaturowych oraz analizy wieloparametrowej. Oceniane będą właściwości optyczne, mechaniczne, chemiczne i powierzchniowe implantów. Opracowany model może umożliwić powiązanie zmian materiałowych z ryzykiem późnych powikłań klinicznych oraz stanowić podstawę bardziej wiarygodnej oceny jakości soczewek wewnątrzgałkowych.

Słowa kluczowe: soczewki wewnątrzgałkowe, IOL, starzenie materiałów, degradacja, badania przyspieszone, biomateriały okulistyczne.

Praca powstała w ramach programu „Doktorat wdrożeniowy” Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego (nr umowy DWD/9/0248/2025).



MU 03

Niedomknięte kryptandy jako receptory wybranych biologicznie istotnych anionów fosforanowych

Karolina Cichocka¹, Magdalena Ceborska¹, Kajetan Dąbrowa²

¹Wydział Matematyczno-Przyrodniczy, Szkoła Nauk Ścisłych, Uniwersytet Kardynała Stefana Wyszyńskiego, ul. Wóycickiego 1/3, 01-938 Warszawa

²Instytut Chemii Organicznej, PAN, Kasprzaka 44/52, 01-224 Warszawa
karolina.cichocka@student.uksw.edu.pl

Niedomknięte kryptandy (Unclosed Cryptands, UCs) stanowią interesującą grupę receptorów supramolekularnych, których budowa umożliwia selektywne wiązanie anionów poprzez oddziaływania niekowalencyjne, w szczególności wiązania wodorowe[1]. Właściwości kompleksujące niedomkniętych kryptandów mogą być modulowane poprzez funkcjonalizację labilnego ramienia lariatowego. Istotnym aspektem jest również wykazana wcześniej zdolność tej grupy związków do efektywnego kompleksowania anionów fosforanowych[2].

W pracy przedstawiono syntezę dwóch 26-członowych niedomkniętych kryptandów zawierających w ramieniu lariatowym podstawnik *p*-nitrofenylowy[3] oraz resztę D-tryptofanu. Zaprezentowano również modelowe propozycje kompleksów z anionem fosforanowym, ilustrujące przewidywany sposób oddziaływania receptor–gość.

Dalszy etap badań będzie obejmował syntezę kolejnych pochodnych niedomkniętych kryptandów z wykorzystaniem różnych podstawników, w tym reszt aminokwasowych glicyny oraz aniliny, a także ocenę zdolności otrzymanych receptorów do kompleksowania biologicznie istotnych anionów fosforanowych, takich jak fosforan, difosforan, pirofosforan (PPi), ATP, ADP i AMP. Planowane badania pozwolą określić wpływ budowy ramienia lariatowego na właściwości kompleksujące oraz selektywność otrzymanych receptorów wobec wybranych anionów fosforanowych.

[1] Dąbrowa, K.; Ceborska, M.; Pawlak, M.; Jurczak, J., Comparative Structural Studies of Four Homologous Thioamidic Unclosed Cryptands: Self-Encapsulation of Lariat Arm, Odd–Even Effects, Anomalously Short S···S Chalcogen Bonding, and More, *Crystal Growth & Design*, **2017** 17 (2): 701–710, <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.6b01551>

[2] Dąbrowa, K.; Lindner, M.; Wasilek, S.; Jurczak, J., Selective Recognition of Chloride by a 24-Membered Macrocyclic Host with a Hydrophobic Methylene-pyrene Substituent, *Eur. J. Org. Chem.* **2020**, 4528–4533, <https://doi.org/10.1002/ejoc.202000662>

[3] Dąbrowa, K.; Ceborska, M.; Jurczak, J., Stabilization of Near Identical Hydrogen Bonded Octameric Water Clusters in Crystal Structures of Three Distinct Non-Charged Polyamide Macrocyclic Host Molecules, *Molecules* **2021**, 26, 2787, <https://doi.org/10.3390/molecules26092787>

Analiza strukturalna substancji czynnych farmaceutycznie – badanie struktury krystalicznej fostamatinibu metodami krystalografii NMR

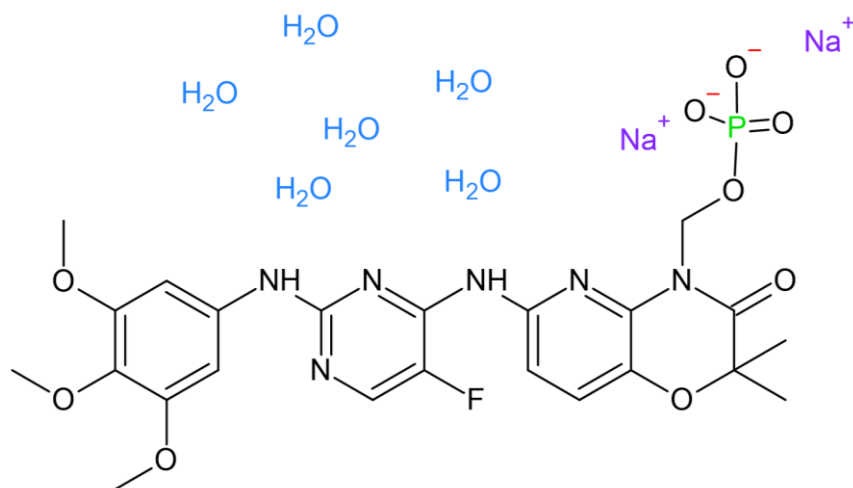
Ewelina Kuc, Piotr Paluch, Marta Dudek

*Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk; Szkoła Doktorska BioMedChem UŁ i Instytutów PAN w Łodzi
ul. Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź;
ewelina.kuc@cbmm.lodz.pl*

Polimorfizm w krystalografii to zjawisko polegające na możliwości występowania danej substancji chemicznej, niebędącej pierwiastkiem chemicznym, w postaci co najmniej dwóch różnych form krystalicznych. Rzetelne opisanie polimorfizmu związku chemicznego jest szczególnie ważne w przypadku badań nad substancjami aktywnymi w lekach, ponieważ różne odmiany polimorficzne mogą wykazywać odmienne właściwości fizykochemiczne np. różnice w rozpuszczalności mogą przełożyć się na zmianę biodostępności danej substancji aktywnej w organizmie pacjenta.

Obecnie badania nad polimorfizmem prowadzi się dwutorowo – obok badań laboratoryjnych opracowuje się metody obliczeniowe CSP (ang. *Crystal Structure Prediction*). Metody te w założeniu mają pozwolić na przewidzenie możliwych form krystalicznych jedynie w oparciu o dwuwymiarowy model cząsteczki interesującego związku chemicznego. W ogólności, składają się z szeregu zadań obliczeniowych, które należy wykonać, przykładowo: (i) wygenerowanie modelu trójwymiarowego związku, (ii) wygenerowanie zbioru struktur krystalicznych, (iii) minimalizacja energii struktur krystalicznych, (iv) ranking energetyczny struktur krystalicznych. Jednakże ze względu na m.in. wysoki koszt obliczeniowy wynikający z konieczności próbkowania wielu parametrów, do procedury CSP włącza się dane eksperymentalne np. więzy strukturalne w postaci odległości międzyatomowych pochodzące z eksperymentów spektroskopii jądrowego rezonansu magnetycznego NMR (ang. *Nuclear Magnetic Resonance*) w ciele stałym.

Celem niniejszego projektu jest wykorzystanie krystalografii NMR do przewidzenia struktury krystalicznej cząsteczek organicznych, np. fostamatinibu, o dużej swobodzie konformacyjnej metodami CSP. Fostamatinib to związek stosowany w terapii chorób autoimmunologicznych. Na dzień dzisiejszy, struktura krystaliczna fostamatinibu nie została opisana w literaturze.



Rys. 1. Fostamatinib dostępny jest jako heksahydrat soli disodowej



MU 05

Od nano(chemii) do mikro(biologii): interdyscyplinarna podróż naukowa przez syntezę, charakterystykę i ocenę potencjału przeciwdrobnoustrojowego biopolimerowych powłok nanosrebrowych

Julia Bielicka, Tomasz Swebocki

*Politechnika Gdańska, Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej, Instytut Inżynierii Materiałowej i Nanotechnologii, G. Narutowicza 11/12, 80-233, Gdańsk, Polska
s204358@student.pg.edu.pl*

Współczesne wyzwania naukowe coraz częściej wymagają przekraczania granic pomiędzy dyscyplinami oraz łączenia kompetencji wywodzących się z różnych obszarów badawczych. Prezentowana praca stanowi przykład takiej współpracy, realizowanej przez mentora i uczennicę, których połączyło zainteresowanie funkcjonalnymi materiałami opartymi na nanocząstkach srebra.

Punktem wyjścia badań była synteza nanocząstek srebra stabilizowanych w układach chitozano-żelatynowych oraz kompleksowa charakterystyka otrzymanych układów obejmująca m.in. spektroskopię UV-Vis, pomiary DLS, mikroskopię SEM oraz analizę właściwości reologicznych. Dla studentki II roku nanotechnologii badania te stanowiły naturalne rozwinięcie zainteresowań związanych z inżynierią materiałową i projektowaniem bionanomateriałów.

W kolejnych etapach projekt został rozszerzony o zagadnienia biologiczne, obejmujące ocenę aktywności przeciwdrobnoustrojowej otrzymanych materiałów wobec *Escherichia coli* oraz metycyloopornego *Staphylococcus aureus* (MRSA) z wykorzystaniem oznaczeń MIC/MBC oraz analizy kinetyki eliminacji bakterii. Tym samym badania stały się dla młodej badaczki pierwszym krokiem w kierunku mikrobiologii, podczas gdy dla mentora stanowiły kontynuację zainteresowań związanych z biologicznymi aspektami funkcjonowania materiałów.

Szczególnym aspektem pracy jest fakt, że rozwój naukowy uczennicy przebiega w kierunku zbliżonym do wcześniejszej ścieżki badawczej mentora. W obu przypadkach zainteresowanie materiałami funkcjonalnymi stało się punktem wyjścia do eksploracji zagadnień biologicznych. Dzięki temu współpraca wykraczała poza przekazywanie wiedzy eksperymentalnej i obejmowała wspólne kształtowanie sposobu myślenia o problemach badawczych oraz integrowanie metod charakterystycznych dla nanotechnologii, inżynierii materiałowej i mikrobiologii.

Uzyskane wyniki potwierdziły wysoki potencjał przeciwdrobnoustrojowy badanych układów, jednak najważniejszym rezultatem pracy pozostaje ewolucja koncepcji badawczej – od syntezy i charakterystyki materiału do oceny jego aktywności biologicznej. Praca pokazuje, że relacja mentor–uczeń może wspierać rozwój samodzielności naukowej oraz inspirować do przekraczania granic pomiędzy dyscyplinami.



MU 06

Stabilność produktów recyklingu chemicznego rPET

Marek Lewandowski^{1,2}, Przemysław Kosobucki¹, Jacek Stuczyński²

¹ Politechnika Bydgoska im. J.J. Śniadeckich;

² Purinova Sp. z o.o.

ul. Fordońska 74; 85-719 Bydgoszcz;

marlew001@pbs.edu.pl

Poli(tereftalan etylenu) (PET) jest jednym z najczęściej stosowanych polimerów termoplastycznych, którego masowa produkcja i odporność na degradację stanowią ogromne wyzwanie dla gospodarki odpadami. W obliczu regulacji UE wymuszających zwiększenie udziału materiałów pochodzących z recyklingu w nowych produktach, ograniczenia recyklingu mechanicznego stają się wyraźnie problematyczne w wyniku postępującej wraz z każdym kolejnym cyklem przetwórczym degradacji tworzywa, co skutkuje pogorszeniem jego właściwości użytkowych [1]. Problem ten występuje w przypadku recyklingu mechanicznego, jednak nie jest przeszkodą dla metod recyklingu chemicznego.

Rozwój recyklingu chemicznego w procesie glikolizy wymaga zwiększania udziału rPET w układach reakcyjnych do poziomu min. 30-40%. Tak wysokie stężenia nieuchronnie prowadzą do niestabilności fazowej i wtórnej krystalizacji powstających oligomerów podczas magazynowania produktu. [2] Obecnie zapobieganie krystalizacji opiera się na wprowadzaniu rozgałęzionych glikoli i innych modyfikatorów w celu zaburzenia symetrii molekularnej, co generuje dodatkowe koszty [3].

Przeprowadzono badania mające na celu określenie wpływu zawartości rPET na parametry fizykochemiczne oraz stabilność produktów jego glikolizy. W tym celu przeprowadzono serię procesów glikolizy rPET oraz polikondensacji otrzymanych glikolizatów z kwasami dwukarboksylowymi z otrzymaniem polioli poliestrowych o zawartości rPET w produkcie końcowym w przedziale 10 – 50%. Otrzymane produkty poddano analizie liczby hydroksylowej, liczby kwasowej, zawartości wody, lepkości dynamicznej oraz mętności. Określono graniczne stężenie rPET w otrzymanych produktach oraz ich stabilność w czasie.

Wykazano potrzebę poszukiwania fizycznych metod zaburzenia symetrii układu bez użycia dodatków chemicznych – takich jak eliminacja uwalnianego glikolu monoetylenowego ze środowiska reakcji w procesie destylacji.

[1] K. Ragaert, L. Delva, K. Van Geem, Mechanical and chemical recycling of solid plastic waste, *Waste Management* 69 (2017) 24–58. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2017.07.044>.

[2] I. Vitkauskienė, R. Makuvska, Glycolysis of industrial poly (ethylene terephthalate) waste directed to bis (hydroxyethylene) terephthalate and aromatic polyester polyols, *CHEMIJA* 19 (2008) 29–34.

[3] S. Zahova, I. Tsacheva, K. Troev, V. Mitova, Conventional and MW assisted PET glycolysis promoted by titanium based catalyst, *Polymer Degradation and Stability* 212 (2023) 110353. <https://doi.org/10.1016/j.polymdegradstab.2023.110353>.



MU 07

Biowęgle aktywne jako skuteczne adsorbenty różnorodnych zanieczyszczeń z fazy wodnej

Karina Tokarska¹, Małgorzata Wiśniewska¹, Piotr Nowicki²

¹*Uniwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie, Wydział Chemii, Instytut Nauk Chemicznych, Katedra Radiochemii i Chemii Środowiskowej, pl. Marii Curie-Skłodowskiej 3, 20-031 Lublin
karina.tokarska@mail.umcs.pl*

²*Uniwersytet im. Adama Mickiewicza, Wydział Chemii, Zakład Chemii Stosowanej, ul. Uniwersytetu Poznańskiego 8, 61-614 Poznań*

Ciągły rozwój przemysłu i postęp cywilizacyjny wiążą się ze wzrostem ilości generowanych zanieczyszczeń, stanowiących istotne zagrożenie dla środowiska naturalnego. Jednym z najistotniejszych problemów jest powstawanie ścieków, które przed ponownym wykorzystaniem lub odprowadzeniem do środowiska wymagają odpowiedniego oczyszczenia. Z tego względu prowadzone są intensywne badania nad opracowaniem nowych, skutecznych i jednocześnie przyjaznych środowisku metod usuwania zanieczyszczeń. Jedną z częściej wykorzystywanych technik jest adsorpcja niepożądanych substancji przy zastosowaniu różnorodnych adsorbentów. Duży potencjał w tym zakresie wykazują węgle aktywne, które dzięki rozwiniętej strukturze porowatej i dużej powierzchni właściwej charakteryzowane są przez bardzo dobre właściwości sorpcyjne względem szerokiej gamy zanieczyszczeń, takich jak barwniki, pestycydy, farmaceutyki, detergenty czy metale ciężkie. Szczególnie interesującym zagadnieniem zgłębianym w naszej grupie badawczej jest wykorzystanie adsorbentów węglowych do usuwania z fazy wodnej substancji polimerowych – jest to nieoczywisty kierunek badań, ponieważ węgle aktywne często utożsamiane są ze strukturą mikroporowatą, która jest niekompatybilna z makromolekularnymi adsorbatami. Jednak wykorzystując odpowiednią metodę aktywacji, można otrzymać materiały o większym udziale mezoporów, co umożliwia adsorpcyjne usuwanie zanieczyszczeń wielkocząsteczkowych.

W kontekście samego otrzymywania skutecznych adsorbentów węglowych prężnie rozwijana jest strategia polegająca na wykorzystaniu biomasy jako surowca startowego. Stanowi ona odnawialny i często odpadowy materiał, który dzięki odpowiedniej obróbce termochemicznej można przekształcić w biowęgle aktywne, zwiększając tym samym ekologiczny i ekonomiczny potencjał stosowania tego typu adsorbentów w procesach oczyszczenia ścieków. Na przestrzeni lat zbadaliśmy możliwość wykorzystania różnorodnej biomasy, m.in. łupin orzechów, pestek owoców, odpadów z przemysłu herbacianego czy trocin drzew. Obecne badania koncentrują się na zagospodarowaniu odpadów powstających w wyniku przetwórstwa owoców powszechnie występujących w Polsce: czarnego bzu, głogu i jarzębiny. Wykorzystując trzy rodzaje aktywacji (bezpośrednią przy pomocy tlenu węgla(IV) oraz chemiczną przy użyciu kwasu fosforowego(V) lub węglanu potasu), dwie metody ogrzewania (konwencjonalną i mikrofalową), a także zróżnicowane temperatury prowadzenia procesu konwersji biomasy, można określić wpływ poszczególnych parametrów na właściwości otrzymywanych biowęgla aktywnych, co umożliwia optymalizację procedury ich produkcji. Celem jest uzyskanie przyjaznych środowisku materiałów węglowych o jak najlepszych właściwościach adsorpcyjnych względem niejonowych substancji organicznych obecnych w ściekach. Obrany kierunek badań jest nieprzypadkowy, ponieważ usuwanie tego typu zanieczyszczeń jest znacznie rzadziej raportowane w literaturze niż ich kationowych lub anionowych odpowiedników, a sam proces adsorpcji jest utrudniony ze względu na brak oddziaływań elektrostatycznych między adsorbentem a adsorbentem. Jako modelowe zanieczyszczenia niejonowe wyselekcjonowano surfaktant Triton X-100, barwnik Disperse Yellow 211 i polimer poli(winylopirolidon), dla których na najlepszych otrzymanych biowęglach aktywnych zaobserwowano maksymalną wielkość adsorpcji wynoszącą kolejno 510, 353 i 201 mg/g, co w odniesieniu do dostępnych danych stanowi wysoce satysfakcjonujący wynik.



MU 08

Gdy pokolenia łączą siły: działalność badawcza Laboratorium Geochemicznego w Instytucie Nauk o Morzu i Środowisku Uniwersytetu Szczecińskiego

Klaudia Małkińska*, Maja Olszanowska*, Weronika Ceglarek*, Joanna Sławińska*, Julita Tomkowiak*, Paweł Osóch*, Ryszard Krzysztof Borówka*, Daniel Okupny*

*Instytut Nauk o Morzu i Środowisku, Uniwersytet Szczeciński;
ul. A. Mickiewicza 18, 70-383 Szczecin;
klaudia.malkinska@usz.edu.pl

Instytut Nauk o Morzu i Środowisku kontynuuje tradycje Instytutu Nauk o Morzu, który rozpoczął swoją działalność z dniem 1.10.1990 roku na ówczesnym Wydziale Biologii i Nauk o Morzu Uniwersytetu Szczecińskiego. Jednak to dopiero dzięki zakupowi spektrometru absorpcji atomowej SOLAR 969 firmy UNICAM w 1997 roku stworzono laboratorium geochemiczne w Zakładzie Geologii i Paleogeografii (obecnie Zespół Badawczy Geologii i Paleogeografii). Laboratorium to obejmowało:

- stanowiska prac przygotowawczych do analiz geochemicznych osadów różnych środowisk sedymentacyjnych, gleb, roślin i wód (dygestoria, suszarki, młyny agatowe, piece muflowe, mineralizatory, liofilizatory, mineralizatory mikrofalowe), uzupełniane wraz z upływem lat w niezbędne urządzenia (np. do oznaczania udziału krzemionki biogenicznej);
- stanowisko do oznaczania wybranych makro- i mikroelementów (SOLAR 969).

W pierwszych latach funkcjonowania laboratorium wypracowano metodykę przygotowania roztworów do analiz AAS, z wykorzystaniem wcześniejszych doświadczeń chemika – mgr inż. Julity Tomkowiak oraz kierownika Zakładu Geologii i Paleogeografii sprawdzonych wcześniej na Uniwersytecie im. A. Mickiewicza w Poznaniu (rozprawa habilitacyjna: Borówka R.K. 1992 – *„Przebieg i rozmiary denudacji w obrębie śródwysoczynowych basenów sedymentacyjnych podczas późnego wistulianu i holocenu”*. Wyd. UAM w Poznaniu, Ser. Geografia nr 54, str. 1-177. W ostatnich latach nowe nurty badawcze podjęto w ramach projektu badawczego finansowanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego - Regionalna Inicjatywa Doskonałości pt.: *„Zwiększenie potencjału, jakości oraz umiędzynarodowienia interdyscyplinarnych badań przyrodniczych”*.

Analizy geochemiczne osadów bagiennych, jeziornych, lagunowych i morskich, a także gleb kopalnych były wykorzystywane w badaniach paleogeograficznych i środowiskowych prowadzonych w ramach szeregu prac magisterskich i licencjackich oraz rozpraw doktorskich, jak również w pracach badawczych wykonywanych w ramach grantów Komitetu Badań Naukowych, Narodowego Centrum Nauki oraz grantów zamawianych przez Ministerstwo Środowiska, Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego i Narodowy Fundusz Ochrony Środowiska. Ponadto dotychczasowe wyniki badań geochemicznych stanowiły cenny zestaw danych w licznych publikacjach z zakresu geochemii środowiska, paleogeografii, geomorfologii oraz geoarcheologii.

Podziękowania

Wyniki badań prezentowane na posterze były częściowo dofinansowane ze środków Ministra Nauki w ramach projektu „Regionalna inicjatywa doskonałości” na lata 2024-2027 (nr RID/SP/0045/2024/01)



MU 09

Od próbki środowiskowej do wiarygodnego wyniku - wyzwania w oznaczaniu hormonów metodą LC-MS/MS

Marianna Piosik¹, Izabela Kruszelnicka¹, Joanna Zembrzuska²

¹ Politechnika Poznańska, Wydział Inżynierii Środowiska i Energetyki, Instytut Inżynierii Środowiska i Instalacji Budowlanych, ul. Berdychowo 4, 60-965 Poznań

² Politechnika Poznańska, Wydział Technologii Chemicznej, Instytut Chemii i Elektrochemii Technicznej, ul. Berdychowo 4, 60-965 Poznań;

adres korespondencyjny;
marianna.piosik@put.poznan.pl

Hormony należą do grupy mikrozanieczyszczeń występujących w środowisku na bardzo niskich poziomach stężeń. Ich analiza jest utrudniona przez złożony i zmienny skład próbek, możliwość strat analitów podczas przygotowania do oznaczenia oraz występowanie efektu matrycowego.

W pracy przedstawiono interdyscyplinarne podejście łączące inżynierię środowiska z chemią analityczną, w którym wyzwania związane z monitoringiem hormonów w wodach, ściekach i glebie stanowiły punkt wyjścia do opracowania i walidacji metody analitycznej. Procedura obejmująca ekstrakcję QuEChERS oraz oznaczenie techniką LC-MS/MS została zaadaptowana do analizy wód powierzchniowych, ścieków i gleby. Umożliwiło to zastosowanie jednej koncepcji przygotowania próbki do matryc o odmiennym charakterze i stopniu złożoności.

Kolejnym etapem była miniaturyzacja procedury zgodnie z założeniami zielonej chemii analitycznej. Ograniczono przede wszystkim zużycie rozpuszczalników i odczynników, bez nadmiernego zmniejszania ilości pobieranej próbki. Takie podejście pozwala zachować jej reprezentatywność, co ma szczególne znaczenie w przypadku niejednorodnych i zmiennych próbek środowiskowych. Przedstawiono wyniki walidacji metody oraz wstępne wyniki odzysków uzyskane dla jej zminiaturyzowanego wariantu.

Omówiono także wybrane problemy związane z walidacją metod stosowanych w monitoringu środowiskowym, obejmujące dobór odpowiedniej matrycy, naturalną obecność analitów w próbkach, zmienność ich składu, sposób wyznaczania LOD i LOQ oraz znaczenie standardów wewnętrznych. Zwrócono uwagę na konieczność wypracowania kompromisu pomiędzy czułością i wiarygodnością oznaczeń, ograniczeniem zużycia odczynników oraz ekonomicznymi aspektami analizy.



Materiały sponsorów i wystawców

BYDGOSZCZ

68. ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO

14-18 WRZEŚNIA 2026

SPONSOR PLATYNOWY
LPP EQUIPMENT



Dystrybutor sprzętu do skali
Laboratoryjnej, Pilotażowej i Przemysłowej.

Skontaktuj się z nami:



+48 22 723 00 96



info.pl@lpp-equipment.pl



www.lpp-equipment.pl



**Passion for sharing
competence**



SPONSOR ZŁOTY

SHIM-POL



O nas

W firmie SHIM-POL 100 pracowników, w tym 30 inżynierów serwisowych, pracuje na rzecz wspólnego sukcesu. Dzięki punktom serwisowym w 10 miastach i 6 biurach na terenie całego kraju udało nam się zrealizować **ponad 5 000 instalacji**.

Naszym celem jest dążenie do doskonałości w nauce oraz wdrażanie najlepszych dostępnych na świecie technologii w dziedzinie analityki.



Od 40 lat firma SHIM-POL jest wiodącym dystrybutorem nowoczesnego sprzętu analitycznego i maszyn badawczych dla przedsiębiorstw i instytucji w Polsce.

W swojej ofercie posiadamy rozwiązania dla niemal każdej gałęzi przemysłu, a w naszych laboratoriach pomożemy Ci opracować indywidualną metodę Twoich badań oraz zapewnić zgodność z normami ISO oraz ASTM.

Dostarczamy szerokie spektrum urządzeń i akcesoriów z obszarów: **chromatografii, spektroskopii, optyki, spektrometrii mas, bioanalizy, przygotowania próbek, analizy powierzchni, defektoskopii, badań materiałowych.**

Poznaj naszą ofertę!

"SHIM-POL A.M. BORZYMOWSKI"

E. Borzymowska-Reszka, A. Reszka Spółka Jawna
ul. Lubomirskiego 5, 05-080 Izabelin
e-mail: biuro@shim-pol.pl, tel.: 22 20 60 900



www.shim-pol.pl



BYDGOSZCZ

68. ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO
TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO

14-18 WRZEŚNIA 2026

SPONSOR ZŁOTY
A.P. INSTRUMENTS



APARATURA ANALITYCZNA I POMIAROWA

BYDGOSZCZ

68.

**ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO
TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO**

14-18 WRZEŚNIA 2026

SPONSOR ZŁOTY

AIR LIQUIDE



GAZY SPECJALNE

Air Liquide dla Polskiej Chemii

Niezawodny partner w badaniach naukowych, R&D oraz zaawansowanej analityce laboratoryjnej.

- ✓ **Marka ALPHAGAZ™:** Dedykowane gazy czyste (klasa 5.0 oraz 6.0) dla spektrometrii i chromatografii od ppm do ppb.
- ✓ **Produkcja w Polsce (Floxfill GS):** Nowoczesna napelnialnia w Dąbrowie Górniczej zapewnia szybkie dostawy i elastyczność.
- ✓ **Mieszanki Precyzyjne:** Produkowane na zamówienie mieszanki kalibracyjne (do 40 składników w jednej butli).

Air Liquide Polska Sp. z o.o.

Gazy Specjalne & Analityka



TECHNOLOGIA I JAKOŚĆ

Innowacje i Oferta ALPHAGAZ™



Gazy Czyste i Mieszanki

Spójna i powtarzalna oferta gazów nośnych i kalibracyjnych dla laboratoriów.

- ALPHAGAZ™ 1 (czystość 99,999%)
- ALPHAGAZ™ 2 (czystość 99,9999%)
- Gazowe Materiały Odniesienia (CRM)
- Mieszanki precyzyjne od % do ppb



Certyfikacja ISO

Gwarancja dokładności pomiarowej i pełnej identyfikowalności wyników.

- Certyfikacja grawimetryczna ISO 6141 / 6142
- Certyfikacja analityczna ISO 6143
- Akredytacja napelnialni wg ISO 17025
- Wdrożenie normy ISO 17034 w Polsce



Zawory SMARTOP™

Opatentowana technologia zaworowa podnosząca bezpieczeństwo i komfort.

- Dźwignia ON/OFF ułatwiająca szybkie odcięcie
- Wbudowany wskaźnik poziomu gazu
- Zawór RPV/NRV zapobiegający zanieczyszczeniu
- Kompleksowa armatura laboratoryjna

Air Liquide Polska Sp. z o.o.

Światowy lider w dziedzinie gazów, technologii i usług dla przemysłu i ochrony zdrowia



SPONSOR SREBRNY
METTLER TOLEDO

METTLER TOLEDO

Tu waży się przyszłość Twojego Laboratorium



Czym się zajmujemy

METTLER TOLEDO to globalny lider w ważeniu laboratoryjnym oraz instrumentach analitycznych, wykorzystywanych w badaniach naukowych i przemyśle, zwłaszcza kosmetycznym, spożywczym i farmaceutycznym. Nasza technologia jest wykorzystywana na każdym etapie produkcji, a nasi specjaliści wspierają firmy w instalacji, kwalifikacji, legalizacji, szkoleniach czy serwisie i certyfikacji.

- Ważenie laboratoryjne, Refraktometry, Gęstościomierze, Titratory,
- pH-metry, Pipety automatyczne, Analiza termiczna,
- Licznik komórek, Reaktory automatyczne,
- Usługi instalacji, kwalifikacji, legalizacji, szkoleń, serwis i certyfikacja.

Nasze produkty i technologie



Skontaktuj się z nami

📍 Adres: ul. Poleczki 21, 02-822 Warszawa

☎ Telefon: +48 22 691 10 10

✉ E-mail: marketing.pl@mt.com

🌐 Strona: www.mt.com



EuChemS
European Chemical Society

BYDGOSZCZ

68. ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO

14-18 WRZEŚNIA 2026



**POLITECHNIKA
BYDGOSKA**
Wydział Technologii
Inżynierii Chemicznej



SPONSOR SREBRNY
UNI-EXPORT



NOWOCZESNE TECHNOLOGIE POMIAROWE DLA NAUKI I PRZEMYSŁU



MIKROSTRUKTURA
Mikroskopia elektronowa • EDS • EBSD • STEM



WŁAŚCIWOŚCI MATERIAŁÓW
BET • Adsorpcja gazów • Porowatość • Powierzchnia właściwa



CZĄSTKI I ZAWIESINY
Wielkość i kształt cząstek • Potencjał zeta • Stabilność



PRÓŻNIA I SZCZELNOŚĆ
Pomiar próżni • Detekcja nieszczelności • Pompy próżniowe





UNI-EXPORT
Instruments Polska



www.UNI-EXPORT.com.pl



OD DOBORU URZĄDZENIA DO GOTOWEGO ROZWIĄZANIA



APLIKACJA

DOBÓR

INSTALACJA

POMIAR

WSPARCIE



DOBÓR TECHNOLOGII
Pomagamy znaleźć rozwiązanie dopasowane do konkretnej aplikacji



INSTALACJA I URUCHOMIENIE
Nie kończymy współpracy na dostawie urządzenia



SZKOLENIE I WSPARCIE
Pomoc w eksploatacji, doborze ustawień i interpretacji wyników



SERWIS
Naprawy, przeglądy, kalibracja, regeneracja i diagnostyka



ROZWIĄZANIA DEDYKOWANE
Projektowanie i budowa systemów dostosowanych do specjalnych wymagań





UNI-EXPORT
Instruments Polska



www.UNI-EXPORT.com.pl

SPONSOR SREBRNY
MERCK - SUPELCO

Nowa era chromatografii

Przyszłość rozpuszczalników jest odnawialna

- ✓ Ta sama jakość, co tradycyjne rozpuszczalniki
- ✓ Gotowe do użycia bez ponownej walidacji
- ✓ Certyfikowana zawartość węgla biogenicznego
- ✓ Spełniają wymogi Ph Eur oraz ACS

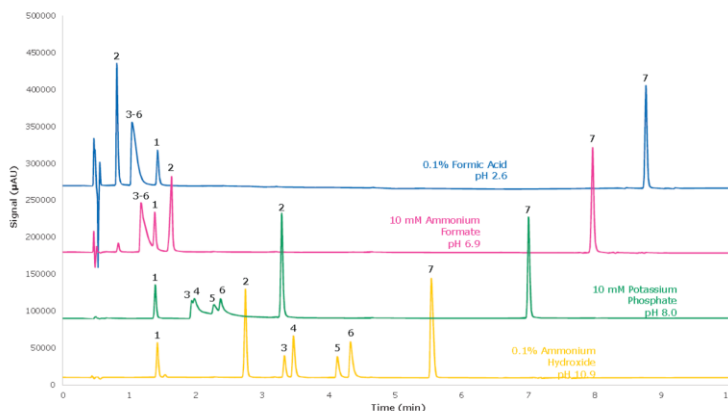
Produkt	Opis	Czystość	% Bio-C
1.04771	Acetonitryl, BioRenewable	Gradientowa	82.2
1.06188	Metanol, BioRenewable	Gradientowa	99.4
1.06176	Metanol, BioRenewable	LC-MS	99.4
1.17480	Etanol, BioRenewable	LC-MS	97.8

Dowiedz się więcej:



MERCK

Kolumny U/HPLC – Fused-Core®
Ascentis® Express 120Å C18 pH+



Związki:

1. Benzoilokgonina, pKa 3.35/pKb 10.82
2. 6-Acetylmorfina, pKa 9.08
3. MDA, pKa 9.67

4. d-Amfetamina, pKa 9.9
5. MDMA, pKa 9.9
6. Metamfetamina, pKa 9.87
7. 11-nor-Δ⁹-karboksy-THC (THC-COOH), pKa 4.8

- ✓ Stabilne w zakresie **pH 2-12**
- ✓ Szczególnie przydatne w analizie związków zasadowych
- ✓ Analizy **LC-MS**
- ✓ Krzemionka powierzchniowo-porowata



Kup z rabatem -60%

MERCK

BYDGOSZCZ

68. ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO

14-18 WRZEŚNIA 2026

SPONSOR SREBRNY

IBB PAN – POL - OPENSREEN

POL OPENSREEN

OTWARTY DOSTĘP DO INNOWACYJNYCH ROZWIĄZAŃ W POSZUKIWANIU ZWIĄZKÓW BIOLOGICZNIE AKTYWNYCH

NH_2
 HO
 CH
 OCH_3
 HN
 H_3CO

• 10722 14-311-172009
 Cb = pH[H⁺] [OH⁻]
 Analysis: Complete.

Cb = pH[H ⁺]	[OH ⁻]	Alp
7.403.98E-08	2.51E-07	0.20
7.602.51E-08	3.98E-07	0.25
8.001.00E-08	1.00E-06	0.50
8.403.98E-09	2.51E-06	0.75

**Zidentyfikuj nowe właściwości
swoich związków**

**Może to być początek badań
nad nowym lekiem**

POL OPENSREEN



Ministerstwo
Edukacji i Nauki

eu openscreen



SPONSOR SREBRNY
CHEMISTRY EUROPE – WILEY-VCH



Chemistry Europe

- 16 chemical societies
- From 15 European countries
- Which co-own 21 scholarly journals
- Over 22,9 million downloads in 2024
- Over 140,000 articles published since 1995
- With 150 Chemistry Europe Fellows and 8 Honorary Fellows recognized for excellence in chemistry

www.chemistry-europe.org

Analysis & Sensing

Analytical Science Advances

Batteries & Supercaps

ChemBioChem

ChemCatChem

ChemElectroChem

ChemFoodChem

ChemistryEurope

Chemistry - A European Journal

Chemistry - Methods

ChemistryOpen

ChemistrySelect

ChemMedChem

ChemPhotoChem

ChemPhysChem

ChemPlusChem

ChemSusChem

ChemSystemsChem

Electrochemical Science Advances

European Journal of Inorganic Chemistry

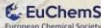
European Journal of Organic Chemistry

Open Access

Chemistry Europe
European Chemical Societies Publishing

published in partnership with

WILEY-VCH



BYDGOSZCZ

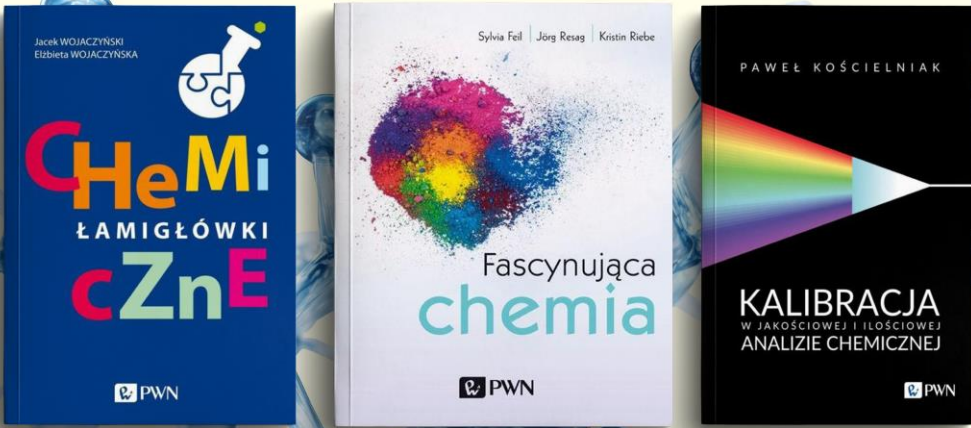
68. ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO

14-18 WRZEŚNIA 2026

WYSTAWCA

PWN

PWN



ODKRYJ CHEMIĘ NA NOWO!

Kod rabatowy PTCHEM -27% rabatu od cen katalogowych na wszystkie książki PWN zapraszamy na ksiegarnia.pwn.pl. Kod ważny do końca września.






BYDGOSZCZ

68. ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO

14-18 WRZEŚNIA 2026





WYSTAWCA
ABL&E JASCO


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

Aparatura i urządzenia laboratoryjne















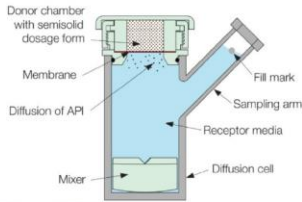
www.jasco.pl


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

Systemy do badania dyfuzji transdermalnej







łatwy pobór próbek • wydajne mieszanie • efektywne grzanie

www.jasco.pl



WYSTAWCA CHEMAT

30 lat
w służbie polskiej nauce

- 2 000 000 produktów w ofercie
- 50 000 zrealizowanych zamówień
- 90 zrealizowanych syntez na zamówienie
- 3 500 zarejestrowanych użytkowników
- 200 dostawców



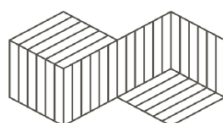


WYSTAWCA

HAAS

NAJNOWSZE SYSTEMY PROCESOWE I ANALITYCZNE

TWOJA WIEDZA, NASZA TECHNOLOGIA



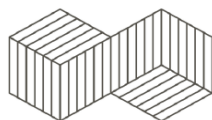
HAAS

NASZA OFERTA

- Zautomatyzowane Reaktory Laboratoryjne, Pilotażowe, Równoległe, Ciśnieniowe i Próżniowe
- Analizatory Termiczne DSC, TGA, STA, DIL, TMA
- Analizatory Przewodności Ciepłej i Elektrycznej Laser i Light Flash, THB, HFM
- Chromatografy Cieczowe Flash, Kolumny i Puste Kartridże
- Ekstraktory i Pompy Wysokociśnieniowe
- Ciśnieniowe Pompy Ultraprecyzyjne, Wyparki, Suszarki Rozpyłowe
- Projektowanie, Wyposażenie Laboratoriów, Szkolenia, Doradztwo



DZIĘKUJEMY I ZAPRASZAMY DO ROZMOWY



HAAS

+48 61 6 229 580 | haas@haas.com.pl | haas.com.pl

HAAS sp. z o.o. | ul. Daleka 13, Poznań | Al. Piłsudskiego 144, Łódź






BYDGOSZCZ
68. ZJAZD NAUKOWY POLSKIEGO TOWARZYSTWA CHEMICZNEGO
14-18 WRZEŚNIA 2026







WYSTAWCA

KEYENCE

KEYENCE

MIKROSKOP CYFROWY VHX-1

Wyjątkowa jakość obrazu

Precyzyjne obrazowanie 2D i 3D





Sponsorzy 68. Zjazdu PTChem

Platynowy Sponsor



Złoty Sponsor





Srebrny Sponsor

METTLER TOLEDO

Your Partner in Precision™



MERCK





Sponsor sesji Mistrz-Uczeń



Wystawcy



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





Patronat Medialny

laboratorium  360

Laboratorium
PRZEGLĄD OGÓLNOPOLSKI

POLIMERY

**przemysł
chemiczny**