



Uniwersytet
Gdański



KSIĘGA ABSTRAKTÓW

**SESJA SPRAWOZDAWCZA DOKTORANTÓW
SZKOŁY DOKTORSKIEJ
PRZY WYDZIALE CHEMII UG**

Gdańsk, 23.06.2026 r.



Komitet Organizacyjny

dr hab. inż. **Anna Białk-Bielińska**, prof. UG – przewodnicząca

mgr **Kamil Antoszewski** – opracowanie redakcyjne i edytorskie

mgr **Katarzyna Prochera**

mgr **Natasza Masłowska**

mgr **Oliwia Bujak**

mgr **Paula Pryba**

mgr **Sümeyye Atmaca**

Katarzyna Mówińska – obsługa administracyjna

Harmonogram Sesji Sprawozdawczej Doktorantów przy Wydziale Chemii UG 23.06.2026 r. sala D3

8 ³⁰ – 9 ⁰⁰	REJESTRACJA UCZESTNIKÓW
9 ⁰⁰ – 9 ¹⁰	OTWARCIE SESJI
SEKCJA I	
9 ¹⁰ – 9 ³⁰	Agata Kowalska (dr hab. Beata Grobelna, prof. UG) <i>Nanostruktury Au@SiO₂ jako innowacyjne systemy dostarczania substancji terapeutycznych</i>
9 ³⁰ – 9 ⁵⁰	Karolina Sławińska (prof. dr hab. Sylwia Rodziewicz-Motowidło) <i>Związki blokujące kompleks TNFα/TNFR2 jako nowa metoda leczenia nowotworów</i>
8 ⁵⁰ – 10 ¹⁰	Magdalena Lipińska (dr hab. Marta Spodzieja) <i>Projektowanie, synteza oraz badania inhibitorów tworzenia kompleksu BTLA/HVEM o sekwencjach aminokwasowych bazujących na białkach CD160 oraz UL144</i>
10 ¹⁰ – 10 ³⁰	Wiktoria Mallek (dr hab. Magdalena Wysocka, prof. UG/dr hab. Agnieszka Piwkowska, prof. IMDiK) <i>Wpływ neutrofilnych proteaz serynowych na regulację funkcji komórki podocytarnej i kłębuszkowej bariery filtracyjnej</i>
10 ³⁰ – 10 ⁵⁰	Mikołaj Marszałek (dr hab. Dawid Dębowski, prof. UG) <i>Koniugaty wybranych chemioterapeutyków z peptydami penetrującymi komórkę i peptydami naprowadzającymi na komórki nowotworowe</i>
10 ⁵⁰ – 11 ³⁰	SESJA POSTEROWA + przerwa kawowa
SEKCJA II	
11 ³⁰ – 11 ⁵⁰	Marta Kalińska (dr hab. Andrzej Nowacki) <i>Synteza i charakterystyka N funkcjonalizowanych pochodnych 1,4-dihydropirydyny zawierających fragmenty węglowodanowe o potencjalnym znaczeniu biologicznym</i>
11 ⁵⁰ – 12 ¹⁰	Michał Sroczyński (prof. dr hab. Piotr Skowron) <i>Biologia syntetyczna zastosowana do biosyntezy problematycznych białek i bionanocząstek nowej generacji</i>
12 ¹⁰ – 12 ³⁰	Oliwia Lange-Andrzejewska (prof. dr hab. Adriana Mika) <i>Determinacja implikacji w otyłości klinicznej poprzez mapowanie zmian metabolomicznych w surowicy pacjentek poddanych interwencji bariatrycznej</i>
12 ³⁰ – 12 ⁵⁰	Paulina Truszkowska (prof. dr hab. Mariusz Makowski) <i>Wpływ anionów w połączeniach koordynacyjnych kadmu(II) na oddziaływanie z biomolekułami oraz aktywność biologiczną</i>
12 ⁵⁰ – 13 ³⁰	LUNCH + SESJA POSTEROWA
SEKCJA III	
13 ³⁰ – 13 ⁵⁰	Aneta Kohnke (prof. dr hab. Ewa Siedlecka) <i>Zastosowanie hybrydowych fotokatalizatorów bizmutowych w ochronie środowiska</i>
13 ⁵⁰ – 14 ²⁰	Marta Pawlak (dr hab. Dagmara Jacewicz, prof. UG) <i>Synteza i badanie właściwości fizykochemicznych nowo otrzymanych związków kompleksowych niklu, kobaltu, wanadu i molibdenu oraz wykorzystanie ich w reakcji oligomeryzacji olefin i izocyjanów</i>
14 ²⁰ – 14 ⁵⁰	Agata Smułka (prof. dr hab. inż. Tadeusz Ossowski) <i>Modyfikacja materiałów elektrodowych warstwami hydrożelowymi w celu detekcji wybranych analitów</i>
14 ⁵⁰ – 14 ¹⁰	Mateusz Leśniewski (prof. dr hab. Józef Liwo) <i>Przewidywanie agregacji peptydów z wykorzystaniem gruboziarnistego pola siłowego UNRES</i>
15 ¹⁰ – 15 ¹⁵	Głosowanie na najlepszą prezentację i poster
15 ¹⁵ – 15 ²⁵	Podsumowanie sesji i ogłoszenie wyników

Spis posterów

Adam Kulesza	P-01
Anna Kościk	P-02
Anna Rojewska	P-03
Damian Makowski	P-04
Daria Łada	P-05
Dawid Falkowski	P-06
Gabriela Mirecka	P-07
Jakub Mazur	P-08
Kacper Kępka	P-09
Kacper Pobłocki	P-10
Kamil Antoszewski	P-11
Kamil Klimkowski	P-12
Katarzyna Prochera	P-13
Klaudia Lanczewska-Bejenka	P-14
Kornelia Kozłowska-Wysocka	P-15
Krzysztof Polaczek	P-16
Maciej Hiller	P-17
Magdalena Mańkowska	P-18
Magdalena Stasiuk	P-19
Martyna Kapica	P-20
Michał Jensko	P-21
Milena Czeszejko	P-22
Monika Dębińska	P-23
Natalia Buławska	P-24
Natalia Wiszowska	P-25
Natalia Wyźlic	P-26
Natalia Żukowska	P-27
Paula Pryba	P-28
Sümeyye Atmaca	P-29
Szymon Świętek Brzeziński	P-30
Szymon Zdybel	P-31

Spis treści

Komunikaty Ustne

1. Agata Kowalska	
Synteza, charakterystyka i ocena potencjału aplikacyjnego nanostruktur rdzeń-powłoka Au@SiO ₂ jako wielofunkcyjnych platform do dostarczania substancji biologicznie aktywnych	9
2. Karolina Sławińska	
Związki blokujące oddziaływanie TNF α /TNFR2 jako nowy sposób leczenia raka	10
3. Magdalena Lipińska	
Peptydy bazujące na sekwencjach aminokwasowych białek CD160 i UL144 jako potencjalne inhibitory tworzenia kompleksu BTLA/HVEM....	11
4. Wiktoria Mallek	
Wpływ neutrofilnych proteaz serynowych na regulację funkcji komórki podocytarnej i kłębuszkowej bariery filtracyjnej	12
5. Mikołaj Marszałek	
Biokoniugaty wybranych chemioterapeutyków z peptydami penetrującymi komórki i peptydami naprowadzającymi na komórki nowotworowe jako kandydaci do wykorzystania w terapii przeciwnowotworowej	13
6. Marta Kalińska	
Synteza i charakterystyka N-funkcjonalizowanych pochodnych 1,4-dihydropirydyny zawierających fragmenty węglowodanowe, o potencjalnym znaczeniu biologicznym.....	14
7. Michał Sroczyński	
Biologia syntetyczna zastosowana do biosyntezy problematycznych białek i bionanocząstek nowej generacji	15
8. Oliwia Lange-Andrzejewska	
Determinacja implikacji klinicznej otyłości poprzez mapowanie zmian metabolomicznych w surowicy pacjentek poddanych interwencji bariatrycznej	16
9. Paulina Truszkowska	
Wpływ anionów na właściwości fizykochemiczne, oddziaływania z biomolekułami oraz aktywność biologiczną połączeń koordynacyjnych kadmu(II)	17
10. Aneta Kohnke	
Zastosowanie hybrydowych fotokatalizatorów bizmutowych w ochronie środowiska	18
11. Marta Pawlak	
Synteza i badanie właściwości fizykochemicznych nowo otrzymanych związków koordynacyjnych niklu, kobaltu, wanadu i molibdenu oraz wykorzystanie ich w reakcji oligomeryzacji olefin i izocyjanów	19
12. Agata Smułka	
Projektowanie i charakterystyka hydrożeli chitozanowych do modyfikacji powierzchni elektrodowych w zastosowaniach elektroanalitycznych.	20
13. Mateusz Leśniewski	
Modelowanie gruboziarniste zespołów konformacyjnych białek wewnętrznie nieuporządkowanych oraz agregatów peptydowych	21

Postery

14. Adam Kulesza	
Metoda projektowania aktywnych biologicznie peptydów oparta o generatywne uczenie głębokie i dynamikę molekularną	23
15. Anna Kościk	
Wykorzystanie spektroskopii fluorescencyjnej oraz spektrofotometrii UV-Vis w badaniach oddziaływań związków wielko- i małocząsteczkowych	24
16. Anna Rojewska	
Identyfikacja nowo pojawiających się zanieczyszczeń w wodach podziemnych z wykorzystaniem analiz niecelowanych	25
17. Damian Makowski	
Właściwości oraz aktywność fotokatalityczna materiałów otrzymanych z MOFs	26
18. Daria Łada	
Synteza nowych pochodnych tetrahydrochinolin-2,5-dionu i ich wykorzystanie w syntezie koniugatów peptydowych	27
19. Dawid Falkowski	
Molecular Dynamics and Quantum Mechanics-Based QSPR model for predicting diffusion coefficient in brownmillerite SOEC structures using internal charge separation as a descriptor.....	28

20. Gabriela Mirecka	
Modyfikowane, rozgałęzione polimery kwasu L-2,3-diaminopropionowego (DAP) jako nietoksyczne odczynniki transfekcyjne	29
21. Jakub Mazur	
Konstrukcja i zastosowanie bionanocząstek nowej generacji w technologiach medycznych	30
22. Kacper Kępka	
Nanomaszyny komórkowa: struktura i funkcja pierścieni L i P motorów molekularnych	31
23. Kacper Pobłocki	
Nowo zsyntezowane związki koordynacyjne niklu(II), kobaltu(II), rodu(III) i rodu(IV): zależność między strukturą krystaliczną, właściwościami fizykochemicznymi oraz aktywnością katalityczną	32
24. Kamil Antoszewski	
Ocena zdolności predykcyjnych modeli fundamentalnych w zakresie przenikania przez barierę krew–mózg (BBB)	33
25. Kamil Klimkowski	
Conjugates of OGF analogs with topoisomerase II inhibitors as an innovative approach in targeted pancreatic cancer therapy	34
26. Katarzyna Prochera	
Fluorescent labelling and functionalization of cell-penetrating peptides Tat(47-57) and TP10	35
27. Klaudia Lanczewska-Bejenka	
Analiza zawartości ^{210}Po i izotopów uranu w składnikach środowiska poeksploatacyjnego w Sudetach	36
28. Kornelia Kozłowska-Wysocka	
Analiza zasad nukleinowych z użyciem utlenionych powierzchniowo elektrod CB-PLA	37
29. Krzysztof Polaczek	
Synteza i badania pętli wiążących rodziny czynników wzrostu PDGF i VEGF jako nowy typ stymulatorów gojenia ran	38
30. Maciej Hiller	
Solar-Driven CO_2 Valorization to Formic Acid over $\text{NH}_2\text{-MIL-125@ZIF-8}$ Heterostructures	39
31. Magdalena Mańkowska	
Badanie kompleksów inkluzyjnych cyklodekstryn z cieczami jonowymi	40
32. Magdalena Stasiuk	
Zależność struktura-aktywność arylowych sulfonamidów w kontekście aktywności wobec wybranych biocząsteczek	41
33. Martyna Kapica	
Charakterystyka kompleksów inkluzyjnych z cyklodekstrynami	42
34. Michał Jensko	
Wykorzystanie algorytmu genetycznego i nawlekania białkowego do optymalizacji gruboziarnistego pola sił UNRES	43
35. Milena Czeszejko	
Funkcjonalne fibryle peptydowe do zastosowań w terapii celowanej	44
36. Monika Dębińska	
Poszukiwanie nowych bakteriofagów termofilnych w próbkach środowiskowych w kierunku zastosowania jako programowane genetycznie bionanocząstki	45
37. Natalia Buławska	
Predicting the Attachment Efficiency of Inorganic Nanomaterials	46
38. Natalia Wiszowska	
Badania ab initio anionów superhalogenowych z centralnym atomem boru: $\text{B}(\text{SO}_4)_2^-$ i $\text{B}(\text{S}_2\text{O}_3)_2^-$: struktury, stabilność i właściwości elektrochemiczne	47
39. Natalia Wyźlic	
Nanocząstki typu Janus Au-Pt wykazujące zdolność do samobieżnego ruchu	48
40. Natalia Żukowska	
Wpływ koordynacji jonów metali na oddziaływanie pochodnej sulfonamidowej z biocząsteczkami	49
41. Paula Pryba	
Analiza oddziaływań pomiędzy enzymem naprawczym PARP1 a jego inhibitorami oraz wybranymi modelami DNA – badanie metodą termoforezy mikroskalowej	50
42. Sümeyye Atmaca	
Development of Improper Torsional Potentials for Coarse-Grained Simulations of Amino-acid Racemization	51

43. Szymon Świętek Brzeziński	
Predicting the Environmental Fate of Nanomaterials: A Probabilistic Framework for Sustainable Nano-Innovation.....	52
44. Szymon Zdybel	
Machine learning/quantum mechanical photodegradation modeling of bisphenols in aquatic media	53
Abstrakty	
45. Adugna Ayu	
Synthesis and Characterization of Photoactive Si-Based Materials for Treatment of Emergency Contaminants.....	54
46. Aleksandra Kruk	
Synteza degraderów lizosomalnych (LYTAC) czynnika martwicy nowotworów alfa do hamowania procesów zapalnych i wzmacniania immunoterapii nowotworów	56
47. Aleksandra Wawrzaszek	
Peptydowe inhibitory punktów kontrolnych LAG3 i CD200	57
48. Barbara Matusiewicz	
Synteza, charakterystyka strukturalna i fizykochemiczna oraz potencjał aplikacyjny nowych związków oksowanadu(IV)	58
49. Bartosz Bigielmajer	
Peptydy z domeny LRR białka SALM5 jako potencjalne inhibitory kompleksu BTLA/HVEM	59
50. David Pawłowski	
Biofunkcjonalizacja powierzchni polimerów poliestrowych poprzez immobilizację peptydów do zastosowań w regeneracji chrząstki stawowej.....	60
51. Eliza Wargala	
Znaczenie znamion kukurydzy (Stigma maydis) w medycznych i kosmetycznych aspektach terapii stopy cukrzycowej	61
52. Hanna Mahilevich	
Which nitroimidazole derivative isomer is the most prone to electron-induced NO ₂ detachment?	62
53. Jan Chodorski	
Inżynieria genetyczna termofilnego bakteriofaga TP84 – elementy nowego, indukowalnego systemu ekspresyjnego	63
54. Karol Topka Kłóńczyński	
Przewidywanie cytotoksyczności nanomateriałów - analiza wpływu strategii walidacji na ocenę skuteczności modelu	64
55. Kinga Marszałek	
Projektowanie i synteza peptydów terapeutycznych o właściwościach przeciwzapalnych i regeneracyjnych do stosowania w leczeniu zespołu wrzodów żołądka u koni (EGUS)	65
56. Kinga Słomska	
Chimery ukierunkowujące na proteolizę (PROTAC) mające na celu eliminację nadmiaru amyloidogennych białek ludzkiego polipeptydu amyloidu wysp trzustkowych (hIAPP)	66
57. Maja Kuźnik	
Substancje farmaceutyczne w skorupkach jaj pingwinów z rodzaju Pygoscelis z Zatoki Admiralicji (Antarktyda).....	67
58. Marcel Pilarski	
Konstrukty PROTAC zdolne do eliminacji nadmiaru amyloidogennego białka: ludzkiego surowiczego amyloidu A (hSAA)	68
59. Marta Pągielska	
PapayaDB: baza danych oddziaływań in silico kompleksów katepsyna–GAG.....	69
60. Mayurdhvaj Parbatsinh Rathod	
Small-molecule inhibition and lysosomal degradation (LYTACs) of TNF- α to enhance immune checkpoint therapy	70
61. Natasza Masłowska	
Badania cytotoksyczności oraz odpowiedzi komórkowej na skojarzone działanie modyfikowanych nukleozydów o właściwościach radiosensybilizujących oraz inhibitorów kinazy białkowej zależnej od DNA (DNA-PK).....	71
62. Oliwia Bujak	
Synteza, charakterystyka oraz ocena neuroprotektynowego i antyoksydacyjnego potencjału nowych koniugatów imatynibu z peptydami penetrującymi komórki.....	72

63. Varun Gopalakrishnan Nair

Molecular-Level Investigation of PFAS and Magnetite (Fe_3O_4): Orientation-Averaged Potentials of Mean Force and Interaction-Potential Descriptors

73

Komunikaty Ustne

Synteza, charakterystyka i ocena potencjału aplikacyjnego nanostruktur rdzeń-powłoka Au@SiO₂ jako wielofunkcyjnych platform do dostarczania substancji biologicznie aktywnych

Agata Kowalska, Elżbieta Adamska, Beata Grobelna

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

agata.kowalska@phdstud.ug.edu.pl

Nanostruktury Au@SiO₂, czyli nanocząstki złota pokryte powłoką krzemionkową, są przedmiotem licznych badań ze względu na swoje wyjątkowe właściwości optyczne, chemiczne i biologiczne. Połączenie złotego rdzenia z krzemionkową otoczką pozwala wykorzystać zalety obu materiałów, co sprawia, że układy te wzbudzają szczególne zainteresowanie w zastosowaniach biomedycznych. W porównaniu z samymi nanocząstkami złota nanosystemy Au@SiO₂ wykazują większą stabilność, ponieważ warstwa krzemionki ogranicza zjawisko agregacji oraz chroni materiał przed oddziaływaniem czynników środowiskowych. Istotnym aspektem jest także poprawa biokompatybilności nanostruktur, ograniczenie potencjalnej toksyczności nanocząstek złota oraz zwiększenie ich biodostępności. Dodatkowo obecność krzemionki umożliwia dalszą modyfikację powierzchni, co sprzyja efektywnemu przyłączaniu substancji terapeutycznych. Powłoka pełni również funkcję ochronną, zabezpieczając transportowane związki przed degradacją. Ważną cechą układów Au@SiO₂ pozostaje możliwość kontrolowanego uwalniania substancji aktywnych, uzyskiwana poprzez odpowiednią regulację grubości i porowatości warstwy krzemionkowej^{1,2}. Ze względu na wymienione właściwości nanostruktury Au@SiO₂ stanowią nowoczesny materiał o dużym potencjale w terapii celowanej, szczególnie jako nośniki substancji leczniczych, w tym związków o charakterze hydrofobowym. Dodatkowo nanostruktury te mogą być inkorporowane do hydrożeli, co stwarza możliwość opracowania zaawansowanych układów do miejscowego i kontrolowanego dostarczania substancji w innowacyjnych opatrunkach leczniczych.

Celem pracy była synteza oraz charakterystyka otrzymanych nanostruktur Au@SiO₂ z wykorzystaniem, między innymi, metod spektroskopowych i mikroskopowych. W dalszej części badań przeprowadzono koniugację nanonośnika z cząsteczkami leku, dokonano charakterystyki materiału po funkcjonalizacji, a także oceniono profil uwalniania substancji czynnej wykorzystując metodę dializy. Dodatkowo zbadano możliwość inkorporacji otrzymanych nanostruktur Au@SiO₂ do matryc hydrożelowych, oceniając stabilność uzyskanych układów oraz ich potencjał aplikacyjny w nowoczesnych systemach dostarczania substancji aktywnych. Uzyskane wyniki wskazują, że opracowane nanostruktury mogą stanowić obiecującą platformę w nowoczesnych strategiach terapeutycznych, szczególnie w zakresie kontrolowanego dostarczania leków oraz projektowania zaawansowanych układów hydrożelowych.

[1] Kowalska, A.; Adamska, E.; Grobelna, B. Medical Applications of Silver and Gold Nanoparticles and Core-Shell Nanostructures Based on Silver or Gold Core: Recent Progress and Innovations. *ChemMedChem* 2024, e202300672, doi:10.1002/cmdc.202300672.

[2] Kowalska, A.; Adamska, E.; Synak, A.; Grobelna, B. The Optimization of the One-Pot Synthesis of Au@SiO₂ Core-Shell Nanostructures: Modification with Dansyl Group and Their Fluorescent Properties. *Materials* 2024, 17, 2213, doi:10.3390/ma17102213.

Związki blokujące oddziaływania TNF α /TNFR2 jako nowy sposób leczenia raka

[Karolina Sławińska](#)¹, *Gabriela Całka-Kuc*¹, *Adam Sieradzan*¹, *Marta Spodzieja*¹, *Theodore Hupp*²,
*Małgorzata Lisowska*², *Maciej Guzik*³, *Justyna Prajsnar*³, *Marta Karpień*⁴, *Justyna Kalinowska-Tłuścik*⁴,
*Sylwia Rodziewicz-Motowidło*¹

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

² Międzynarodowe Centrum Badań nad Szczepionkami Przeciwnowotworowymi, ul. Kładki 2, 80-822 Gdańsk

³ Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni im. Jerzego Habera Polskiej Akademii Nauk ul. Niezapominajek 8, 30-239 Kraków

⁴ Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński, Gronostajowa 2, 30-387, Kraków

karolina.slawinska@phdstud.ug.edu.pl

Szlak sygnałowy TNF α /TNFR2 odgrywa istotną rolę w progresji nowotworów poprzez bezpośrednią stymulację proliferacji komórek nowotworowych oraz promowanie ekspansji immunosupresyjnych regulatorowych limfocytów T (Treg)¹. W związku z tym blokowanie oddziaływania pomiędzy TNF α /TNFR2 stanowi obiecującą strategię terapeutyczną w onkologii. Celem realizowanej pracy doktorskiej jest identyfikacja i charakterystyka nowych związków zdolnych do blokowania tworzenia kompleksu TNF α /TNFR2. W ramach badań analizowano trzy grupy potencjalnych inhibitorów: fragmenty przeciwciał, peptydy oraz małowcząsteczkowe związki organiczne.

Za pomocą technologii phage display wyselekcjonowano fragment przeciwciała typu single-chain variable fragment (scFv) wiążący TNFR2. ScFv to fragmenty przeciwciał wysoce specyficzne, odpowiadające za rozpoznawanie i wiązanie antygeny. Pomiary siły wiązania metodą MST wykazały wysokie powinowactwo scFv do TNFR2 (K_d = 250 nM). Równolegle, zaprojektowano peptydy na podstawie analizy interfejsu wiążącego białka TNF α z wykorzystaniem obliczeń MM/GBSA. Optymalizacja sekwencji oraz stabilizacja struktury poprzez wprowadzenie mostków disiarczkowych pozwoliły wytypować peptyd GR7D jako najbardziej obiecującego kandydata. W testach ELISA wykazał on około 40% inhibicji tworzenia kompleksu TNF α /TNFR2, natomiast pomiary MST potwierdziły jego specyficzne wiązanie do TNFR2 (K_d = 229 μ M).

Trzecie podejście obejmowało wirtualny screening biblioteki Enamine PPI w celu identyfikacji małowcząsteczkowych inhibitorów. Biblioteka ta składała się z ponad 40 tys. związków organicznych². Na podstawie badań dokowania molekularnego wytypowano cztery związki wiodące, spośród których związek MC4 wykazał najwyższe powinowactwo do TNFR2 (K_d = 6,8 nM).

Otrzymane wyniki dla peptydu wskazują, że receptor TNFR2 może być skutecznie blokowany. Zdolność uzyskanego fragmentu przeciwciała do blokowania tworzenia kompleksu jest obecnie weryfikowana. Związki małowcząsteczkowe mimo silnego wiązania nie wykazują właściwości inhibicyjnych. Wszystkie związki wymagają dalszej analizy ich skuteczności w badaniach komórkowych.

Badania sfinansowano ze środków Narodowego Centrum Nauki NCN (UMO 2021/41/B/NZ7/03312) "Blokowanie oddziaływań TNF-TNFR2 jako nowa metoda leczenia raka jajnika"

[1] Li L, Ye R, Li Y, Pan H, Han S, Lu Y. Targeting TNFR2 for cancer immunotherapy: recent advances and future directions. J Transl Med. 2024;22(1). doi:10.1186/s12967-024-05620-x

[2] Enamine PPI Library available online: <https://enamine.net/compound-libraries/targeted-libraries/ppi-library> (accessed on 12.08.2025).

Peptydy bazujące na sekwencjach aminokwasowych białek CD160 i UL144 jako potencjalne inhibitory tworzenia kompleksu BTLA/HVEM

[Magdalena Lipińska](#)¹, Piotr Ciura¹, Adam Sieradzan¹, Peter Steinberger², Emilia Sikorska¹, Anna Wardowska³, Marta Spodzieja¹

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

² Uniwersytet Medyczny w Wiedniu, Instytut Immunologii, 1090 Wiedeń, Lazarettgasse 19

³ Gdański Uniwersytet Medyczny, Wydział Lekarski, 80-211 Gdańsk, Dębinki 7

magdalena.lipinska@phdstud.ug.edu.pl

Blokada punktów kontrolnych układu odpornościowego stanowi obecnie jedną z kluczowych strategii immunoterapii. Punkty kontrolne układu immunologicznego (ICP, ang. *immune checkpoints*) to receptory zlokalizowane na powierzchni limfocytów T, które tworzą kompleksy ze swoimi ligandami obecnymi na komórkach prezentujących antygen¹. Takie kompleksy mogą przekazywać sygnały zarówno stymulujące, jak i hamujące aktywację, proliferację oraz produkcję cytokin przez limfocyty T. Zarówno stymulujące, jak i hamujące ICP odgrywają istotną rolę w utrzymaniu homeostazy układu odpornościowego.

Komórki nowotworowe również mogą ekspozycjonować na swojej powierzchni ligandy dla receptorów hamujących, co pozwala im wykorzystywać mechanizmy tłumiące odpowiedź immunologiczną organizmu. Blokada punktów kontrolnych polega na podawaniu inhibitorów, które zapobiegają tworzeniu się takich kompleksów i pobudzają układ odpornościowy do zwalczania komórek nowotworowych.

Jednym z mniej poznanych punktów kontrolnych jest białko HVEM (ang. *Herpes Virus Entry Mediator*), które tworzy kompleks z receptorem BTLA (ang. *B and T Lymphocyte Attenuator*)². Dotychczas wykazano negatywną rolę tego kompleksu w mikrośrodowisku m.in. czerniaka, raka jelita grubego i żołądka, a także w rozwoju niektórych chorób autoimmunologicznych^{3,4}. Poza oddziaływaniem z BTLA, HVEM wiąże się również z receptorem CD160, przy czym oba receptory posiadają częściowo nakładające się miejsca wiązania. Z kolei białko BTLA wiąże się również z białkiem UL144, wytwarzanym przez ludzkiego wirusa cytomegalii (HCMV), które charakteryzuje się dużą homologią do białka HVEM⁵.

Celem niniejszych badań było zaprojektowanie, synteza oraz ocena właściwości hamujących peptydów bazujących na białkach CD160 i UL144, ukierunkowanych na zaburzenie interakcji BTLA/HVEM. Przeprowadzone badania pozwoliły wytypować dwa peptydy, które skutecznie hamują tworzenie kompleksu BTLA/HVEM. Peptyd A5, bazujący na sekwencji białka CD160 wiąże się z białkiem HVEM ze stałą wiązania $K_d = 1,38 \mu\text{M}$ oraz hamuje powstawanie kompleksu BTLA/HVEM zarówno w testach ELISA i badaniach komórkowych. Z kolei peptyd K2, bazujący na sekwencji białka UL144, wiąże się do białka BTLA ze stałą $K_d = 56,6 \mu\text{M}$ i skutecznie blokuje wiązanie się białka HVEM do BTLA we wstępnych testach ELISA.

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 toczeniu rumieniowatym układowym”

[1] Sharma P, Allison JP. The future of immune checkpoint therapy. *Science*. 2015;348(6230):56-61. doi:10.1126/science.aaa8172

[2] Paulos CM, June CH. Putting the brakes on BTLA in T cell-mediated cancer immunotherapy. *J Clin Invest*. 2010;120(1):76-80. doi:10.1172/JCI41811

[3] Demerlé C, Gorvel L, Olive D. BTLA-HVEM Couple in Health and Diseases: Insights for Immunotherapy in Lung Cancer. *Front Oncol*. 2021;11:682007. doi:10.3389/fonc.2021.682007

[4] Wojciechowicz K, Spodzieja M, Lisowska KA, Wardowska A. The role of the BTLA-HVEM complex in the pathogenesis of autoimmune diseases. *Cell Immunol*. 2022;376:104532. doi:10.1016/j.cellimm.2022.104532

[5] Bitra A, Nemčovičová I, Picarda G, et al. Structure of human cytomegalovirus UL144, an HVEM orthologue, bound to the B and T cell lymphocyte attenuator. *J Biol Chem*. 2019;294(27):10519-10529. doi:10.1074/jbc.RA119.009199

Wpływ neutrofilnych proteaz serynowych na regulację funkcji komórki podocytarnej i kłębuszkowej bariery filtracyjnej

[Wiktor Mallek](#)¹, Aleksandra Wróblewska-Schmude², Agnieszka Piwkowska², Adam Lesner¹,
Magdalena Wysocka¹

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

² Instytut Medyczny im. Mossakowskiego Polskiej Akademii Nauk, ul. Adolfa Pawińskiego 5, 02-106 Warszawa, Polska

wiktor.mallek@phdstud.ug.edu.pl

Cukrzyca, definiowana jako grupa zaburzeń metabolicznych objawiających się przewlekłą hiperglikemią, stanowi według WHO główną przyczynę poważnych powikłań zdrowotnych. Jednym z jej najgroźniejszych następstw jest cukrzycowa choroba nerek (DKD). Mimo postępów w medycynie, patogeneza DKD nie została w pełni wyjaśniona. Coraz więcej dowodów wskazuje jednak na kluczowe znaczenie dysfunkcji podocytów, wywołanej m.in. niekontrolowaną aktywnością enzymów proteolitycznych, co prowadzi do naruszenia kłębuszkowej bariery filtracyjnej i rozwoju białkomoczu¹⁻³.

Celem pracy było zaprojektowanie i synteza nowych związków chemicznych służących do monitorowania aktywności proteaz, co może stać się podstawą wczesnej diagnostyki nefropatii cukrzycowej. Wykorzystując strategię chemii kombinatorycznej (metoda porcjowania i łączenia), zsyntezowałam biblioteki tetra- i heptapeptydowych substratów fluorescencyjnych. Zostały one poddane iteracyjnej dekonwolucji względem rekombinowanej mysiej elastazy neutrofilowej (rMNE). Równolegle badałam wpływ ludzkich proteaz neutrofilowych oraz deiminaz peptydyloargininy (PAD) w uszkodzeniu i śmierci podocytów poddanych działaniu różnych stresorów metabolicznych.

Przeprowadzone analizy pozwoliły na identyfikację specyficznych substratów umożliwiających śledzenie procesów proteolitycznych w materiale biologicznym. Wykazano również istotny udział badanych enzymów w mechanizmach śmierci komórkowej podocytów. Uzyskane wyniki nie tylko pogłębiają wiedzę o patomechanizmie DKD, ale również otwierają drogę do opracowania nowych narzędzi diagnostycznych, które mogą znacząco poprawić rokowania pacjentów poprzez wcześniejsze wdrożenie celowanej terapii.

Praca finansowana ze środków NCN w ramach projektu OPUS 21 nr 2021/41/B/NZ4/02797

[1] Zimmet, P. Z. et al. Diabetes: a 21st century challenge. *Lancet Diabetes Endocrinol.* 2, 56–64 (2014).

[2] Diabetes. <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/diabetes>.

[3] Audzeyenka, I. et al. Cathepsin C is a novel mediator of podocyte and renal injury induced by hyperglycemia. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular Cell Research* 1867, 118723 (2020).

Biokoniugaty wybranych chemioterapeutyków z peptydami penetrującymi komórkę i peptydami naprowadzającymi na komórki nowotworowe jako kandydaci do wykorzystania w terapii przeciwnowotworowej

Mikołaj Marszałek^{1,2}, Dawid Dębowski¹, Natalia Ptaszyńska²

¹ Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Bionieorganicznej

² Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Biochemii Molekularnej

mikolaj.marszalek@phdstud.ug.edu.pl

Według przewidywań WHO rak stanie się główną przyczyną zgonów na świecie po 2030 r., wyprzedzając choroby układu sercowo-naczyniowego. Jednym z czynników ryzyka zachorowania na nowotwór jest starszy wiek. Dane demograficzne nie są optymistyczne – polskie społeczeństwo coraz bardziej się starzeje. Dlatego należy intensywnie poszukiwać skutecznych terapii przeciwnowotworowych. Dotychczas jedną z najczęściej stosowanych metod leczenia pozostaje chemioterapia, polegająca na ogólnoustrojowym podawaniu leku cytostatycznego. Jednak posiada ona dwie zasadnicze wady. Pierwszą z nich jest niespecyficzny mechanizm działania. Leki te niszczą komórki nowotworowe charakteryzujące się szybkimi podziałami oraz uszkadzają szybko dzielące się zdrowe komórki różnych narządów wewnętrznych, m.in. szpiku kostnego, nabłonka przewodu pokarmowego, mieszków włosowych i komórki gonad. Tak poważne skutki uboczne są uciążliwe i niebezpieczne dla pacjenta, a ponadto wymuszają na lekarzach konieczność ograniczania dawki leku, przez co rokowania stają się gorsze. Drugą wadą chemioterapii jest lekooporność, która podczas leczenia może wykształcać się w komórkach nowotworowych.

W leczeniu raka na znaczeniu zyskuje terapia celowana. Wykorzystane do niej mogą zostać koniugaty związków peptydowych. Koniugaty są molekułami powstałymi przez kowalencyjne połączenie ze sobą dwóch lub więcej cząsteczek, z których jedna pełni rolę nośnika, a druga spełnia funkcje lecznicze.

Głównym celem badań jest synteza koniugatów wybranych chemioterapeutyków stosowanych w leczeniu raka połączonych z odpowiednimi nośnikami, których rolę pełnią peptydy należące do dwóch grup. Pierwszą grupę stanowią peptydy penetrujące komórkę (ang. cell-penetrating peptides, CPPs) o wykazanej zdolności do wnikania do komórki. Natomiast drugą grupę stanowią peptydy naprowadzające na komórki nowotworowe (ang. tumor-targeting peptides, TTPs), mające szczególne powinowactwo do komórek rakowych lub naczyń krwionośnych oplatających guzy.

Peptydy będące składowymi koniugatów syntezowałem na nośniku stałym, po czym dołączone do nich zostały odpowiednie łączniki, a następnie związki o działaniu cytotoksycznym. Produkty pośrednie oraz końcowe poddane były analizie jakościowej za pomocą wysokosprawnej chromatografii cieczowej w odwróconym układzie faz oraz spektrometrii mas. Otrzymane koniugaty poddawane były badaniom biologicznym w laboratorium prof. Iwony Inkielewicz-Stępiak (Gdański Uniwersytet Medyczny) lub przez dr Natalię Maciejewską (Politechnika Gdańska).

Praca dofinansowana ze środków projektów BMN nr 539-T060-B054-23, 539-T060-B141-24 oraz 539-T060-B212-25

[1] Mattiuzzi C, Lippi G. Current Cancer Epidemiology. J Epidemiol Glob Health. 2019;9(4):217-222. doi:10.2991/jegh.k.191008.001

[2] Rubach M, Objawy niepożądane w chemioterapii [w:] Podstawy onkologii klinicznej, red.: Meder J, Centrum Medyczne Kształcenia Podyplomowego, Warszawa (Polska), 2011, 127-146

[3] Nagy A, Schally AV. Targeting cytotoxic conjugates of somatostatin, luteinizing hormone-releasing hormone and bombesin to cancers expressing their receptors: a "smarter" chemotherapy. Curr Pharm Des. 2005;11(9):1167-1180. doi:10.2174/1381612053507594

[4] Guidotti G, Brambilla L, Rossi D. Cell-Penetrating Peptides: From Basic Research to Clinics. Trends Pharmacol Sci. 2017;38(4):406-424. doi:10.1016/j.tips.2017.01.003

[5] Zhu YS, Tang K, Lv J. Peptide-drug conjugate-based novel molecular drug delivery system in cancer. Trends Pharmacol Sci. 2021;42(10):857-869. doi:10.1016/j.tips.2021.07.001

Synteza i charakterystyka *N*-funkcjonalizowanych pochodnych 1,4-dihydropirydyny zawierających fragmenty węglowodanowe, o potencjalnym znaczeniu biologicznym

Marta Kalińska¹, Piotr Szweda², Adam Prah¹, Beata Liberek¹, Andrzej Nowacki¹

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

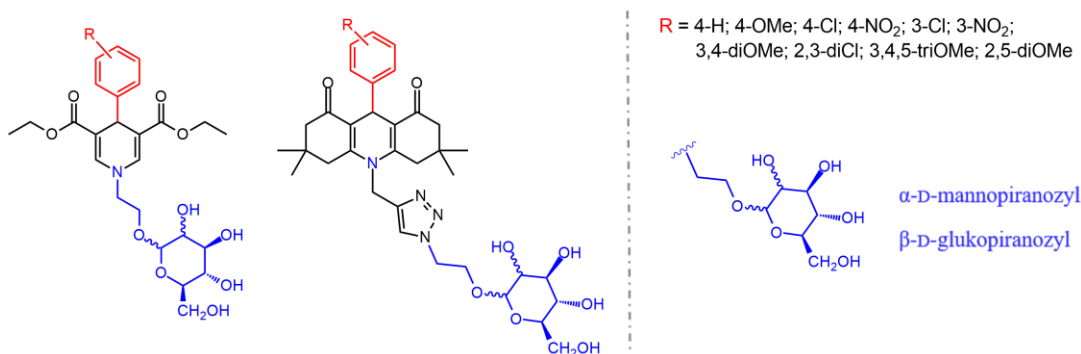
² Politechnika Gdańska, Wydział Chemii, 80-233 Gdańsk, Gabriela Narutowicza 11/12

marta.kalinska@phdstud.ug.edu.pl

1,4-Dihydropirydyny (1,4-DHP) stanowią istotną klasę azotowych heterocykli wykorzystywanych we współczesnej chemii medycznej i organicznej ze względu na zróżnicowaną aktywność biologiczną oraz możliwość szerokiej modyfikacji strukturalnej^{1,2}. Właściwości pochodnych 1,4-DHP są silnie uzależnione od rodzaju i położenia podstawników, dlatego rozwój metod funkcjonalizacji tego układu pozostaje ważnym kierunkiem badań³. Szczególne zainteresowanie budzą *N*-podstawione pochodne 1,4-DHP, umożliwiające modyfikację właściwości związku bez naruszania heterocyklicznego rdzenia. Jednym z kierunków ich modyfikacji jest przyłączanie jednostek monosacharydowych do atomu azotu pierścienia.

W ramach badań opracowano dwie metody syntezy *N*-funkcjonalizowanych pochodnych 1,4-DHP zawierających jednostki monosacharydowe. W pierwszej strategii pochodne 1,4-DHP otrzymano metodą MCR z udziałem propiolanu etylu, aldehydów aromatycznych o zróżnicowanym podstawieniu oraz octanu amonu, a następnie poddano *N*-alkilowaniu glikozydami 2-bromoetylowymi. W drugiej strategii wykorzystano pochodne 1,4-DHP otrzymane metodą MCR z udziałem dimedonu, aldehydów aromatycznych o zróżnicowanym podstawieniu oraz octanu amonu, które po *N*-propargylowaniu poddano reakcji CuAAC (cykloaddycji azydki do alkinu katalizowanej jonami miedzi(I)) z udziałem glikozydów 2-azydoetylowych.

Obie strategie umożliwiły skuteczne przyłączenie fragmentów monosacharydowych do atomu azotu pierścienia 1,4-DHP. Wybrane związki poddano badaniom aktywności przeciwbakteryjnej wobec szczepów bakterii Gram-dodatnich i Gram-ujemnych.



Rys. 1. Struktury otrzymanych *N*-alkilowanych pochodnych 1,4-DHP, zawierających elementy strukturalne pochodzenia monosacharydowego

[1] Sharma V.K, Singh S.K, RSC Adv, 2017, 7, 2682-2702.

[2] Mishra A.P, Bajpai A, Rai A.K, Mini Rev Med Chem, 2019, 19, 1219-1254.

[3] Takahashi D, Oyunzul L, Onoue S, et al., Biol Pharm Bull, 2008, 31, 473-479.

Biologia syntetyczna zastosowana do biosyntezy problematycznych białek i bionanocząstek nowej generacji

[Michał Sroczynski](#)¹, Daria Krefft¹, Ireneusz Sobolewski¹, Joanna Żebrowska¹, Piotr M. Skowron¹,
Monika Šimoliūnienė², Eugenijus Šimoliūnas²

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

² 2Vilnius University, Life Sciences Center, LT-10257 Vilnius, Sauletekio Av. 7

michal.sroczynski@phdstud.ug.edu.pl

Postępy w biologii syntetycznej pozwalają na ekspresję coraz bardziej złożonych białek heterologicznych. W zależności od późniejszego zastosowania białka, ważny jest wybór odpowiedniego systemu ekspresyjnego. Przy wyborze należy wziąć pod uwagę szereg czynników, ponieważ każdy z systemów ekspresyjnych ma swoje ograniczenia. Jednym z nich jest problem w ekspresji genów kodujących toksyczne białka.

Celem badań prowadzonych w ramach rozprawy doktorskiej jest stworzenie nowego systemu ekspresyjnego, opartego na bazie istniejącego już w naturze letalnego systemu biologicznego, jakim jest lityczny system bakteriofagowo-bakteryjny. Posłuży on do biosyntezy rekombinowanych, toksycznych dla gospodarza bakteryjnego białek. Przeprowadzane są badania, wykorzystujące narzędzia inżynierii genetycznej i biologii syntetycznej, skupiające się na zrealizowaniu sześciu głównych zadań.

Zadaniem 1. jest potwierdzenie domniemanych genów kodujących białka, między innymi o funkcjach strukturalnych. Pozwoli to na całościowe poznanie i scharakteryzowanie genomu termofilnego bakteriofaga TP-84. Dzięki kolejnym klonowaniom molekularnym, ekspresji testowanych genów i późniejszej analizie proteomicznej z wykorzystaniem chromatografii LC-MS/MS, udało się potwierdzić białka nr 42. i 62. faga TP-84.

Celem zadania 2. jest przeanalizowanie próbek środowiskowych, na obecność innych bakteriofagów, kodujących własną polimerazę RNA i unikalne promotory transkrypcji. Po analizie próbek środowiskowych pozyskanych z pomorskich biogazowni, udało się odkryć dwa potencjalnie nowe bakteriofagi, infekujące gospodarza bakteryjnego faga TP-84 - *G. stearothermophilus*. Dodatkowo, dzięki współpracy z naukowcami z Uniwersytetu Wileńskiego, którzy dostarczyli próbkę nowo odkrytego bakteriofaga, udało mi się zoptymalizować jego hodowlę, wyizolować jego materiał genetyczny, który następnie zsekwencjonowano. Ustalono, że genom faga vB_GthS_P2.1 składa się z dsDNA o wielkości 47005 pz, w którego sekwencji znajduje się 77 sekwencji kodujących polipeptydy, o masie 3,5 kDa lub większej.

Cel zadania 3. i 4. to zaprojektowanie i skonstruowanie zmodyfikowanego genetycznie bakteriofaga TP-84, który posłuży do wygenerowania wektorów klonująco/ekspresyjnych. Do faga TP-84 udało mi się wklonować sekwencje regulatorowe z dzikiego bakteriofaga lambda. Wykorzystany do tego został gen *cl*, który koduje białko represorowe i sekwencje promotorów P_{RM} i P_R !. Do tak stworzonego chimerycznego faga wklonowano termostabilny wariant genu, białka testowego – sfGFP. Obecnie prowadzona jest modyfikacja tego konstrukt

Badania zostały sfinansowane przez Narodowe Centrum Nauki (NCN OPUS 25 nr 2023/49/B/NZ2/03357) oraz częściowo Uniwersytet Gdański (UGrants-start 2026 nr 533-BG20-GS1Y-26)

Determinacja implikacji klinicznej otyłości poprzez mapowanie zmian metabolomicznych w surowicy pacjentek poddanych interwencji bariatrycznej

[Oliwia Lange-Andrzejewska](#)¹, Aleksandra Budny³, Agata Janczy⁴, Maciej Wilczyński⁵, Michał Szymański⁵,
Monika Proczko-Stepaniak⁵, Tomasz Śledziński², Adriana Mika^{1,2}

¹ Katedra Analizy Środowiska, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański

² Katedra Biochemii Farmaceutycznej, Wydział Farmaceutyczny, Gdański Uniwersytet Medyczny

³ Klinika Nadciśnienia i Diabetologii, Wydział Lekarski, Gdański Uniwersytet Medyczny

⁴ Zakład Towaroznawstwa Żywności, Wydział Nauk o Zdrowiu, Gdański Uniwersytet Medyczny

⁵ Klinika Chirurgii Ogólnej, Endokrynologicznej i Transplantologicznej, Wydział Lekarski, Gdański Uniwersytet Medyczny

oliwia.lange@phdstud.ug.edu.pl

Chirurgiczne leczenie otyłości indukuje głębokie zmiany metaboliczne, których podłoże wykracza poza restrykcję kaloryczną¹. Celem badań jest komparatywna ocena wpływu resekcji mankietowej żołądka (LSG) i ominięcia żołądkowego (OAGB) na wielokierunkowe interakcje kwasów żółciowych (BA), aminokwasów (AA) oraz kwasów tłuszczowych (FA).

Metodyka: Surowicę krwi kobiet poddanych LSG i OAGB pobierano w czterech punktach czasowych. Oznaczenia metabolomiczne wykonano metodami celowanymi. Analizę ilościową BA i AA przeprowadzono techniką chromatografii cieczowej sprzężonej z tandemową spektrometrią mas (LC-MS/MS) w trybie monitorowania wybranych reakcji (MRM). Profil FA zbadano metodą chromatografii gazowej (GC-MS) po uprzedniej hydrolizie i derywatywacji do estrów metylowych. Dane zaimplementowano do liniowych modeli mieszanych (LMM).

Obie procedury wywołały spadek wskaźnika HOMA-IR i wygaszenie stanu zapalnego (CRP). W grupie OAGB odnotowano 4-krotny wzrost stężenia BA, głównie pierwotnych koniugatów glicynowych i taurynowych, przy stabilizacji puli w LSG. Wyłącznie po OAGB nastąpił systematyczny przyrost kwasów rozgałęzionych (BCFA, iso-BCFA), czemu towarzyszył obustronny spadek krążących aminokwasów rozgałęzionych (BCAA). W profilu lipidowym odnotowano obniżenie stężenia wielonienasyconych kwasów n-3 (DHA, EPA). Ponadto obie metody zredukowały poziom asymetrycznej dimetyloargininy (ADMA) – endogennego inhibitora syntazy tlenu azotu. Stężenie lizyny uległo stabilizacji po OAGB, drastycznie spadając w LSG.

Uzyskane wyniki dowodzą, że OAGB indukuje silniejszą rekonfigurację szlaków biochemicznych niż LSG. Gwałtowna akumulacja krążących koniugatów BA po OAGB sugeruje wzmożoną aktywację receptorów FXR/TGR5 jako mechanizm remisji glikemicznej. Z kolei spadek stężenia inhibitora ADMA potwierdza odblokowanie ścieżki syntezy tlenu azotu i poprawę funkcji śródbłonki niezależnie od typu operacji. Współwystępowanie ubytku BCAA i przyrostu BCFA po OAGB stanowi odzwierciedlenie cross-talku AA-FA, w którym aminokwasy rozgałęzione służą jako substrat do syntezy. Dodatkowo homeostaza lizyny po OAGB może warunkować dostępność prekursorów do syntezy karnityny i stymulować mitochondrialną beta-oksydację, podczas gdy powszechny spadek kwasów n-3 wskazuje na konieczność ich rutynowej suplementacji po obu zabiegach.

[1] Mika A, Janczy A, Waleron K, Szymanski M, Kaska L, Sledzinski T. The impact of the interplay of the intestinal microbiome and diet on the metabolomic and health outcomes of bariatric surgery. *Obes Rev.* 2022;23(8):e13455. doi:10.1111/obr.13455

Wpływ anionów na właściwości fizykochemiczne, oddziaływania z biomolekułami oraz aktywność biologiczną połączeń koordynacyjnych kadmu(II)

[Paulina Truszkowska](#), Sandra Brzeska, Mariusz Makowski

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

paulina.truszkowska@ug.edu.pl

Narastająca oporność patogenów grzybiczych na dostępne farmaceutyki powoduje konieczność poszukiwania nowych związków o odmiennym mechanizmie działania oraz korzystniejszych właściwościach fizykochemicznych^{1,2}. Jednym z kierunków takich badań są związki metali grup przejściowych bloku *d*. Dzięki swoim często unikalnym właściwościom, możliwości tworzenia połączeń koordynacyjnych oraz zdolności do oddziaływania z biomolekułami stanowią one alternatywę dla klasycznych małącząsteczkowych leków organicznych, które nie zawsze wykazują zadowalającą skuteczność terapeutyczną. Mimo iż Cd(II) jest powszechnie znany ze swojego profilu toksykologicznego, wykazano, że odpowiednie chelatowanie jego jonu pozwala istotnie ograniczać jego szkodliwe działanie. Sprawia to, że związki koordynacyjne jonów Cd(II) są coraz częściej badane pod kątem ich właściwości strukturalnych i zastosowań farmakologicznych. Aktywność biologiczna w połączeniach koordynacyjnych może być modulowana m.in. przez stopień utlenienia jonu metalu, geometrię, strukturę liganda oraz rodzaj anionu w sferze koordynacyjnej³.

Prezentowane wyniki badań dotyczą połączeń koordynacyjnych kadmu(II) z ligandem imidazolowym, różniących się rodzajem anionów halogenkowych w sferze koordynacyjnej (Cl^- , Br^- , I^-) oraz obecnością anionu PF_6^- pełniącego funkcję przeciwnjonu. Związki scharakteryzowano pod względem ich właściwości spektroskopowych (UV-Vis) oraz elektrochemicznych z wykorzystaniem metod voltamperometrycznych. Oddziaływania z helisą DNA oraz białkiem albuminy bydlęcej (BSA) analizowano z wykorzystaniem technik switchSense oraz izotermicznej kalorymetrii miareczkowej (ITC). Dodatkowo oceniono wpływ badanych pochodnych na strukturę drugorzędową BSA, wykorzystując technikę dichroizmu kołowego (CD). W celu określenia potencjału biologicznego i farmakologicznego omawianych związków przeprowadzono badania *in vitro* obejmujące aktywność przeciwbakteryjną, przeciwnowotworową oraz przeciwgrzybiczą. Do identyfikacji miejsc wiązania oraz mechanizmu działania wykorzystano dokowanie molekularne na wybranym enzymie docelowym CYP51 z *Candida albicans* (PDB 5V5Z) oraz *Candida glabrata* (PDB 5JLC). Wśród badanych związków największy współczynnik selektywności wykazywał układ zawierający anion Br^- w sferze koordynacyjnej, co stanowi istotne potwierdzenie słuszności przyjętych założeń badawczych⁴.

[1] WHO Fungal Priority Pathogens List to Guide Research, Development and Public Health Action. 1st ed. World Health Organization; 2022

[2] Lu X, Zhou J, Ming Y, Wang Y, He R, Li Y, Feng L, Zeng B, Du Y, Wang C, Show more Next-generation antifungal drugs: Mechanisms, efficacy, and clinical prospects. *Acta Pharmaceutica Sinica B*. 2025;15(8):3852-3887. doi:10.1016/j.apsb.2025.06.013

[3] Egorova KS, Ananikov VP. Toxicity of Metal Compounds: Knowledge and Myths. *Organometallics*. 2017;36(21):4071-4090. doi:10.1021/acs.organomet.7b00605

[4] Truszkowska P, Maciejewska N, Wyrzykowski D, Roviello G. N, Brzeska S, Makowski M, Cadmium(II) imidazole coordination complexes as selective antifungal agents against resistant *Candida*: insights into protein binding, electrochemistry, and CYP51-targeted mechanism, *Journal of Inorganic Biochemistry*, 2026, under review.

Zastosowanie hybrydowych fotokatalizatorów bizmutowych w ochronie środowiska

Aneta Kohnke, Patrycja Wilczewska, Ewa Siedlecka

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

aneta.kohnke@phdstud.ug.edu.pl

Farmaceutyki i ich metabolity są powszechnie wykrywane w wodach powierzchniowych i w oczyszczonych ściekach. Ze względu na ich wysoką toksyczność i niską skuteczność usuwania przez konwencjonalne oczyszczalnie ścieków, ulegają one akumulacji w środowisku. Nowa Dyrektywa Ściekowa (NDŚ) UE przyjęta w 2024 r. wprowadza obowiązek usuwania mikrozanieczyszczeń¹, dlatego istnieje pilna potrzeba opracowania nowych innowacyjnych technologii umożliwiających efektywne usuwanie tego typu związków. Procesy zaawansowanego utleniania w tym fotokataliza heterogeniczna, stanowią przyjazną dla środowiska, nowoczesną oraz niskoenergetyczną metodę usuwania związków farmaceutycznych². Realizowane badania w ramach pracy doktorskiej odpowiadają na potrzebę opracowania skutecznych metod usuwania farmaceutyków ze środowiska wodnego.

Celem pracy doktorskiej był efektywne usuwanie leków przeciwnowotworowych z użyciem bezpiecznych dla środowiska hybrydowych fotokatalizatorów bizmutowych o silnych właściwościach utleniających i/lub redukujących. W ramach pracy doktorskiej zsyntezowano cztery serie fotokatalizatorów: a) heterozłącze $\text{Bi}_4\text{O}_5\text{Br}_2/\text{Bi}_{24}\text{O}_{31}\text{Br}_{10}$ (DBOB) modyfikowane wielościennymi nanorurkami węglowymi: 2.5%MWCNTs-X/DBOB (X= -H, -OH, -COOH), b) heterozłącze $x\%\text{Bi}_2\text{MoO}_6/\text{g-C}_3\text{N}_4$ (x= 5, 7.5, 10%), c) heterozłącze $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3\text{-Bi}_2\text{O}_2\text{CO}_3$ oraz d) heterozłącze $\text{BiOBr}(1:0.75)/5\%\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Wszystkie otrzymane fotokatalizatory charakteryzowały się wysoką efektywnością usuwania wybranych farmaceutyków, takich jak cyklofosamid, 5-fluorouracyl, ifosfamid oraz karbamazepina. Materiały wykazywały wysoką zdolność generowania anionorodnika ponadtlenkowego, a także efektywnie aktywowały PDS lub PMS, w zależności od rodzaju otrzymanej fazy bizmutowej. Fotokatalizatory zawierające bogate w bizmut fazy halogenkowe wykazywały większą skuteczność aktywacji PDS, natomiast materiały oparte na prostych halogenkach bizmutu efektywniej aktywowały PMS. Dla każdej serii materiałów wykonano kompleksową charakterystykę oraz wykonano ocenę właściwości fotokatalitycznych względem wybranego leku. Badania te uwzględniały parametry takie jak: badanie mechanizmu reakcji, wpływ jonów nieorganicznych i kwasu humusowego, a także optymalizację warunków prowadzenia procesu fotokatalitycznego. Dodatkowo, dla każdej serii materiałów przeprowadzono ocenę ekotoksyczności roztworów po procesie fotokatalitycznego usuwania wybranego leku. Testy ekotoksyczności potwierdziły spadek toksyczności roztworów po procesie fotokatalitycznym.

[1] Dyrektywa Parlamentu Europejskiego i Rady (UE) 2024/3019 z dnia 27 listopada 2024 r. dotycząca oczyszczania ścieków komunalnych, Dz.U. UE L, 2024/3019, 12.12.2024, <http://data.europa.eu/eli/dir/2024/3019/oj>.

[2] Yuan, Z, Jiang, L, Yang, H, Liang, Z, Zhang, D, Li, B, Xie, H, Zhan, X, Recent Progress and Challenges of Bismuth-Based Photocatalysts: Fundamentals and Applications. Small, 2025, 21(37), <https://doi.org/10.1002/sml.202506133>

Synteza i badanie właściwości fizykochemicznych nowo otrzymanych związków koordynacyjnych niklu, kobaltu, wanadu i molibdenu oraz wykorzystanie ich w reakcji oligomeryzacji olefin i izocyjanków

[Marta Pawlak](#)¹, *Katarzyna N. Jarzemska*², *Radosław Kamiński*², *Łukasz Ponikiewski*³, *Dagmara Jacewicz*¹

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

² Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, 02-089 Warszawa, Żwirki i Wigury 101

³ Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Nieorganicznej, 80-233 Gdańsk, Narutowicza 11/12

marta.pawlak@phdstud.ug.edu.pl

Kataliza jest jedną z najprężniej rozwijających się dziedzin chemii, napędzaną przez wysokie zapotrzebowanie na selektywne układy katalityczne. Szczególnie intensywny wzrost liczby opracowywanych katalizatorów można zaobserwować w procesach polimeryzacji i oligomeryzacji. Związki koordynacyjne, zwłaszcza zawierające metale z grupy d w centrum metalicznym, należą do najczęściej stosowanych układów w katalizie homogenicznej. Charakteryzują się one licznymi zaletami, takimi jak łatwość syntezy oraz szerokie możliwości modyfikacji strukturalnych.

Przeprowadzono syntezę serii związków koordynacyjnych opartych na jonach niklu(II), kobaltu(II/III), oksowanadu(IV/V) oraz molibdenu(VI) zawierających różnorodne strukturalnie ligandy organiczne w sferze koordynacyjnej. Dokładną strukturę zsyntezowanych związków oraz ich właściwości fizykochemiczne określono z wykorzystaniem metod spektroskopowych, analizy XRD, oraz badań stabilności termodynamicznej w roztworze wodnym. Ponadto zastosowanie ligandów różniących się typem donora, dentatowością oraz wymaganiami sterycznymi umożliwiło przeprowadzenie analizy porównawczej ich wpływu na geometrię koordynacyjną, siłę pola ligandowego oraz ogólną organizację strukturalną otrzymanych kompleksów.

Właściwości katalityczne zsyntezowanych kompleksów zbadano w procesach oligomeryzacji wybranych olefin (etylenu, prop-2-en-1-olu, 2-chloroprop-2-en-1-olu oraz norbornenu) oraz izocyjanku cykloheksylu. Otrzymane produkty oligomeryzacji zostały poddane analizie ilościowej oraz jakościowej w celu określenia ich właściwości fizykochemicznych. Różnorodność strukturalna zsyntezowanych związków umożliwiła określenie i porównanie wpływu struktury katalizatorów na ich aktywność katalityczną, a także właściwości fizykochemiczne uzyskanych produktów.

Wyniki przedstawione w niniejszym badaniu stanowią istotny wkład w chemię koordynacyjną metali przejściowych, zwłaszcza w kontekście zależności struktura-aktywność w katalizie koordynacyjnej olefin i izocyjanków. Przeprowadzone badania poszerzają bibliotekę katalizatorów opartych na metalach bloku d oraz dostarczają cennych eksperymentalnych informacji na temat wciąż słabo zbadanego obszaru. Uzyskane wyniki mogą stanowić podstawę do dalszego rozwoju układów katalitycznych wykorzystywanych w procesach oligomeryzacji.

[1] Q. Zhou, Transition-Metal Catalysis and Organocatalysis: Where Can Progress Be Expected?, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016; 55: 5352–5353. <https://doi.org/10.1002/anie.201509164>.

[2] N. Patel, V. Valodkar, G. Tembe, Recent developments in catalyst systems for selective oligomerization and polymerization of higher α -olefins, *Polym. Chem.* 2023; 14: 2542–2571. <https://doi.org/10.1039/D3PY00028A>.

[3] H. Ishikura, R. Neven, T. Lange, A. Galetová, B. Blom, D. Romano, Developments in vanadium-catalysed polymerisation reactions: A review, *Inorg. Chim. Acta* 2021; 515: 120047. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2020.120047>.

[4] F. Zaera, Designing Sites in Heterogeneous Catalysis: Are We Reaching Selectivities Competitive With Those of Homogeneous Catalysts?, *Chem. Rev.* 2022; 122: 8594–8757. <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00905>.

Projektowanie i charakterystyka hydrożeli chitozanowych do modyfikacji powierzchni elektrodowych w zastosowaniach elektroanalitycznych

Agata Smulka, Tadeusz Ossowski, Dorota Zarzeczkańska

Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii Analitycznej

agata.smulka@phdstud.ug.edu.pl

Chitozan jest polimerem naturalnym, posiadającym zdolność do tworzenia membran hydrożelowych o właściwościach umożliwiających ich zastosowanie jako materiałów do modyfikacji powierzchni elektrod np. w sensorach elektrochemicznych. Ze względu na obecność grup aminowych i hydroksylowych w łańcuchu chitozanu możliwa jest dalsza modyfikacja chemiczna i fizyczna polimeru, co pozwala dostosować właściwości materiału do konkretnych zastosowań np. w analityce chemicznej

Celem pracy było opracowanie hydrożelu chitozanowego, a następnie modyfikacja powierzchni elektrod oraz ustalenie właściwości elektrochemicznych otrzymanych układów.

Zbadano wpływ parametrów syntezy, m.in. odpowiedni dobór składu hydrożelu, sposób syntezy, dobór środka sieciującego oraz stosunek substratów, ponieważ nawet niewielkie zmiany mogą wpływać na charakterystykę elektrochemiczną zmodyfikowanych elektrod¹.

Ponadto należy uwzględnić środowisko i pH syntezy tego typu hydrożeli, ponieważ obecność grup zdolnych do jonizacji, generuje ładunek powierzchniowy na uzyskanych elektrodach. Wykazano zależność właściwości powierzchniowych i odpowiedzi elektrochemicznej od pH środowiska, co umożliwia kontrolowanie selektywności procesów powierzchniowych w interakcji z analitami, szczególnie zależnymi od pH np. kwasu askorbinowego, kontrolowanych elektrochemicznie².

Dodatkową zaletą hydrożeli chitozanowych jest możliwość dalszej funkcjonalizacji, na przykład poprzez wprowadzenie centrów aktywnych lub elektropolimerów. Przeprowadzono funkcjonalizację matryc hydrożelowych poprzez wprowadzenie polinoradrenaliny na drodze elektropolimeryzacji, a otrzymane materiały wykazywały zmienione właściwości powierzchniowe, optyczne i elektrochemiczne.

Uzyskane wyniki potwierdzają potencjał hydrożeli chitozanowych jako wszechstronnych materiałów do projektowania funkcjonalnych powierzchni elektrodowych przeznaczonych do zastosowań sensorycznych.

[1] Smulka A, Cieślak M, Olejnik A, Zieliński A, Ryl J, Ossowski T. Unlocking the electrochemical performance of glassy carbon electrodes by surface engineered, sustainable chitosan membranes. *Bioelectrochemistry*, 161, 2025, 108804.

[2] Smulka A, Olejnik A, Zarzeczkańska D, Wcisło A, Ryl J, Zieliński A, Ossowski T. pH-mediated charge tuning of chitosan membrane: a smart approach to control electrochemical selectivity. *Electrochimica Acta* 533, 2025, 146541.

Modelowanie gruboziarniste zespołów konformacyjnych białek wewnętrznie nieuporządkowanych oraz agregatów peptydowych

[Mateusz Leśniewski](#), Józef Liwo

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

mateusz.lesniewski@phdstud.ug.edu.pl

Białka wewnętrznie nieuporządkowane nie posiadają stabilnej struktury trójwymiarowej w warunkach fizjologicznych, a mimo to uczestniczą w szerokim spektrum procesów biologicznych. Szczególnie interesującą ich podgrupę stanowią peptydy oraz fragmenty białek, które pozostają nieuporządkowane jako pojedyncze łańcuchy, lecz w wyniku agregacji nabywają wyraźnie zorganizowaną strukturę. Zdolność tych układów do samoorganizacji i separacji fazowej leży u podstaw wielu zjawisk tak odmiennych, jak powstawanie bezbłonowych organelli komórkowych oraz patogenezę chorób neurodegeneracyjnych, w tym choroby Alzheimera oraz choroby Parkinsona. W ostatnich latach zaczęto również wykorzystywać je jako elementy budulcowe zaawansowanych biomateriałów nanostrukturalnych. Eksperymentalna obserwacja tych układów jest jednak utrudniona przez ich dynamiczną naturę, nanoskalowe wymiary oraz przejściowy charakter najwcześniejszych załączków agregacji. Metody symulacji komputerowych pozwalają pokonać część tych ograniczeń, jednak kooperatywny charakter agregacji wymaga, by obejmowały one wiele cząsteczek i były prowadzone w długich skalach czasowych, często przekraczających mikrosekundy, co czyni stosowanie modeli pełnoatomowych niepraktycznym.

W niniejszej pracy¹ skupiliśmy się na krótkich peptydach w celu zbadania procesu ich agregacji, oraz jednym dłuższym o znaczeniu biologicznym, peptydzie sygnałowym butyrylocholinoesterazy, wykorzystując oparte na fizyce, gruboziarniste pole siłowe UNRES opracowane i rozwijane w naszym laboratorium, w połączeniu z dynamiką molekularną z wielokrotną wymianą replik (MREMD). Podejście to umożliwiło śledzenie asocjacji peptydów w dużych, wielocząsteczkowych układach przy zachowaniu rozsądnego kosztu obliczeniowego. Uzyskane wyniki pozwoliły ustalić w jaki sposób sekwencja aminokwasowa decyduje o skłonności peptydu do agregacji oraz o morfologii powstających struktur, a także scharakteryzować czynniki decydujące o ich stabilności. Wyniki symulacji porównaliśmy następnie z danymi doświadczalnymi, które potwierdziły ich trafność.

Uzyskane wyniki pogłębiają rozumienie sekwencyjnych uwarunkowań samoorganizacji peptydów oraz zespołów konformacyjnych białek elastycznych i mogą znaleźć zastosowanie zarówno w badaniach chorób, których przyczyną jest nieprawidłowa agregacja białek, jak i w racjonalnym projektowaniu nanomateriałów peptydowych.

[1] M. Leśniewski, R. Dutkiewicz, M. Targońska, K. Waleron, B. Wasąg, A. Liwo, J. Jasiecki. Structural and aggregation studies of the butyrylcholinesterase signal peptide combining in vitro experiments and in silico simulations. *Chemico-Biological Interactions*, 433 (2026) 112082

Postery

Metoda projektowania aktywnych biologicznie peptydów oparta o generatywne uczenie głębokie i dynamikę molekularną

[Adam Kulesza](#)¹, *Cezary Czaplewski*²

¹ Uniwersytet Gdański, Szkoła Doktorska przy Wydziale Chemii, Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

² Uniwersytet Gdański, Pracownia Symulacji Polimerów, Wydział Chemii, Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

adam.kulesza@phdstud.ug.edu.pl

Peptydy stanowią istotną grupę biomolekuł biorących udział w wielu kluczowych procesach biologicznych, takich jak sygnalizacja komórkowa, aktywność hormonalna czy regulacja układu immunologicznego¹. Jednocześnie ich rozmiar sprawia, że stanowią one swoisty pomost pomiędzy związkami małowcząsteczkowymi a białkami, wykazując wysoką specyficzność i zmniejszoną toksyczność co czyni je cenną platformą do rozwoju nowych terapeutyków². Jednak znalezienie nowych peptydów, które mogłyby pełnić tę rolę, pozostaje wyzwaniem ze względu na bardzo dużą ilość możliwych sekwencji i związane z tym koszty eksperymentalnych badań przesiewowych. Projektowanie peptydów z wykorzystaniem metod obliczeniowych pozwala na generowanie dużej ilości sekwencji peptydowych o pożądanych właściwościach, w krótkim czasie oraz przy niskich nakładach finansowych.

W ramach badań opracowano protokół umożliwiający generowanie sekwencji peptydowych wykazujących powinowactwo do zadanego obszaru na powierzchni białka. Trzonem metody jest opracowany w ramach projektu generatywny model uczenia głębokiego wytrenowany w oparciu o dane strukturalne kompleksów białko-peptyd. Architektura modelu stanowi połączenie grafowych sieci neuronowych służących do przetwarzania informacji strukturalnych o kieszeni wiążącej oraz metod przetwarzania języka naturalnego służących do generowania na podstawie struktury kieszeni wiążącej potencjalnie wiążącej się do niej sekwencji peptydu. W ramach protokołu wygenerowane sekwencje są następnie przesiewane w oparciu o ich wyznaczoną metodami in-silico stabilność, rozpuszczalność, oraz przewidzianą przez służący do predykcji struktur białek model RoseTTAFold3³ pozycje peptydu względem kieszeni wiążącej. Następnie najlepiej rokujące sekwencje zostały poddane krótkim, 100ns pełnoatomowym symulacjom dynamiki molekularnej oraz wykonanej następnie analizie interfejsu oddziaływań białko-peptyd.

W ramach badań skupiono się na wykorzystaniu metody w celu zaprojektowania potencjalnych inhibitorów ukierunkowanych na zablokowanie szlaku PD-1/PDL-1, będącego celem wielu terapii przeciwnowotworowych⁴.

[1] Wang L, Wang N, Zhang W, et al. Therapeutic peptides: current applications and future directions. *Sig Transduct Target Ther.* 2022;7(1):48. doi:10.1038/s41392-022-00904-4

[2] Xiao W, Jiang W, Chen Z, et al. Advance in peptide-based drug development: delivery platforms, therapeutics and vaccines. *Sig Transduct Target Ther.* 2025;10(1):74. doi:10.1038/s41392-024-02107-5

[3] Corley N, Mathis S, Krishna R, et al. Accelerating Biomolecular Modeling with AtomWorks and RF3. *Biochemistry*. Preprint posted online August 14, 2025. doi:10.1101/2025.08.14.670328

[4] Han Y, Liu D, Li L. PD-1/PD-L1 pathway: current researches in cancer. *Am J Cancer Res.* 2020;10(3):727-742.

Wykorzystanie spektroskopii fluorescencyjnej oraz spektrofotometrii UV-Vis w badaniach oddziaływań związków wielko- i małowcząsteczkowych

[Anna Kościk](#), Krzysztof Żamojć, Joanna Makowska

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

anna.koscik@phdstud.ug.edu.pl

Oddziaływania pomiędzy małowcząsteczkowymi związkami bioaktywnymi, a makrowcząsteczkami biologicznymi odgrywają kluczową rolę w procesach odpowiedzialnych za biodostępność, transport oraz aktywność biologiczną substancji o potencjalnym znaczeniu farmaceutycznym. Szczególne zainteresowanie budzą flawonoidy stanowiące rozległą grupę naturalnych metabolitów wtórnych o charakterze polifenolowym, szeroko rozpowszechnionych w tkankach roślinnych – liściach, płatkach kwiatów, owocach, nasionach oraz korzeniach¹ – wykazujących szerokie spektrum aktywności biologicznej. Modyfikacje strukturalne tych związków, takie jak prenylacja, geranylacja czy kompleksowanie jonami metali, mogą istotnie wpływać na ich właściwości fizykochemiczne i biologiczne. Mimo intensywnych badań nad flawonoidami, wciąż istnieje istotna luka badawcza dotycząca wpływu prenylacji i geranylacji naryngeniny na oddziaływania z białkami transportującymi oraz wpływu kompleksowania jonami miedzi(II) na właściwości wiążące wybranych flawonoidów.

Celem projektu doktorskiego jest wypełnienie tej luki badawczej poprzez określenie, w jaki sposób prenylacja, geranylacja oraz kompleksowanie jonami Cu(II) wpływają na charakter i siłę oddziaływań flawonoidów z makrowcząsteczkami biologicznymi. Badania prowadzono z wykorzystaniem spektroskopii fluorescencyjnej i spektrofotometrii UV-Vis, stosując albuminę surowicy bydlęcej (BSA) jako modelowe białko transportujące.

W ramach projektu przeprowadzono badania oddziaływań BSA z naryngeniną oraz jej prenylowanymi i geranylowanymi pochodnymi: 6-prenylnaryngeniną, 8-prenylnaryngeniną i 6-geranylnaryngeniną. Badane ligandy stanowiły pochodne naryngeniny występujące w żywicznych gruczołach łupuliny pokrywających łuski żeńskich szyszek chmielu zwyczajnego (*Humulus lupulus* L.)².

Drugim nurtem badań była synteza i charakterystyka kompleksów miedzi(II) z hesperetyną, hesperydyną, genisteiną oraz biochaniną A³. Otrzymane związki scharakteryzowano metodami analizy elementarnej, spektroskopii ATR-IR oraz dyfrakcji rentgenowskiej XRD, potwierdzając tworzenie układów metal-ligand. Dla wybranych kompleksów przeprowadzono badania oddziaływań z BSA oraz ocenę aktywności biologicznej na liniach komórkowych keratynocytów i fibroblastów.

Uzyskane rezultaty dostarczają nowych informacji dotyczących wpływu prenylacji, geranylacji oraz kompleksowania jonami metali na właściwości wiążące flawonoidów. Wyniki mogą znaleźć zastosowanie w projektowaniu nowych substancji o potencjalnym znaczeniu farmaceutycznym, kosmetycznym i biomedycznym.

[1] Carlsen SC, Mortensen AG, Oleszek W, Piacente S, Stochmal A, Fomsgaard IS. Variation in flavonoids in leaves, stems and flowers of white clover cultivars. *Phytochemistry*. 2008;69(10):2038-2047. doi:10.1016/j.phytochem.2008.04.004

[2] Terao J, Mukai R. Prenylation modulates the bioavailability and bioaccumulation of dietary flavonoids. *Arch Biochem Biophys*. 2014;559:12-16. doi:10.1016/j.abb.2014.08.001

[3] Alper P, Erkisa M, Mutlu Genckal H, Sahin S, Ulukaya E, Ari F. Synthesis, characterization, anticancer and antioxidant activity of new nickel(II) and copper(II) flavonoid complexes. *J Mol Struct*. 2019;1196:783-792. doi:10.1016/j.molstruc.2019.07.009

Identyfikacja nowo pojawiających się zanieczyszczeń w wodach podziemnych z wykorzystaniem analiz niecelowanych

[Anna Rojewska](#)¹, *Paweł Rostkowski*², *Jean Froment*², *Hans Gundersen*², *Anna Białk-Bielińska*¹

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

² NILU

anna.rojewska@phdstud.ug.edu.pl

Nowo pojawiające się zanieczyszczenia stanowią istotne wyzwanie dla monitoringu środowiska wodnego, szczególnie w przypadku wód podziemnych. Wody te stanowią jedno z głównych źródeł wody pitnej, jednak ich skład chemiczny może ulegać zmianom pod wpływem naturalnie zachodzących procesów jak i działalności przemysłowej, rolniczej czy urbanizacji. Ze względu na ograniczoną zdolność samooczyszczania oraz długi czas retencji zanieczyszczenia antropogeniczne mogą utrzymywać się w wodach podziemnych przez wiele lat, wpływając na jakość ujmowanej wody¹.

Powszechnie stosowane analizy celowane obejmują jedynie monitoring wcześniej wytypowanych związków, podczas gdy w środowisku mogą występować liczne substancje nieuwzględnione w rutynowych badaniach. W związku z tym coraz większe znaczenie zyskują analizy niecelowane, umożliwiające kompleksową charakterystykę składu chemicznego próbek środowiskowych oraz identyfikację zanieczyszczeń mogących mieć znaczenie dla bezpieczeństwa wody pitnej. Dlatego też celem przeprowadzonych badań była identyfikacja nowo pojawiających się zanieczyszczeń w wodach podziemnych z rejonu województwa pomorskiego z wykorzystaniem analiz niecelowanych. Próbki wód podziemnych pobrano z lokalizacji potencjalnie narażonych na wpływ działalności antropogenicznej. Do przygotowania próbek zastosowano technikę ekstrakcji do fazy stałej (SPE), natomiast analizy przeprowadzono metodą chromatografii cieczowej sprzężonej z tandemową wysokorozdzielczą spektrometrią mas (LC-HR-MS/MS). Przetwarzanie oraz interpretację danych wykonano z użyciem oprogramowania Compound Discoverer.

Przeprowadzone analizy wykazały wyraźne zróżnicowanie składu chemicznego badanych próbek wód podziemnych w zależności od lokalizacji. Zaobserwowane różnice w liczbie wykrywanych sygnałów mogą wskazywać na wpływ lokalnych źródeł zanieczyszczeń antropogenicznych. Wśród zidentyfikowanych związków wykryto substancje należące do różnych grup zanieczyszczeń, w tym farmaceutyków, pestycydów oraz związków przemysłowych. Uzyskane wyniki potwierdzają przydatność analiz niecelowanych w kompleksowej ocenie jakości wód podziemnych oraz podkreślają znaczenie tego podejścia w monitorowaniu nowo pojawiających się zanieczyszczeń.

[1] Gasco Caverio S, Santamarta J.C, Cruz-Pérez N, et al. Comparative study of emerging pollutants of interest in the groundwater of the volcanic islands of La Palma and El Hierro (Canary Islands). *Science of the Total Environment*. 2024;927. doi:10.1016/j.scitotenv.2024.172026

Właściwości oraz aktywność fotokatalityczna materiałów otrzymanych z MOFs

[Damian Makowski](#), *Beata Bajorowicz, Adriana Zaleska-Medynska*

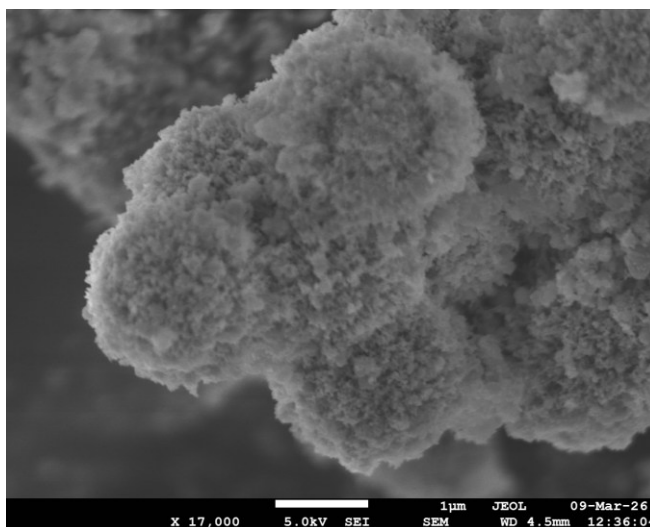
Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Technologii Środowiska 80-308 Gdańsk, Wita Stwosza 63

damian.makowski@phdstud.ug.edu.pl

Postępujące zmiany klimatyczne oraz konieczność ograniczenia emisji gazów cieplarnianych sprawiają, że coraz większe znaczenie zyskują alternatywne źródła energii. Szczególną uwagę zwraca się na zastosowanie wodoru, który dzięki wysokiej wartości energetycznej i braku emisji zanieczyszczeń podczas użytkowania uznawany jest za obiecujący nośnik energii przyszłości¹. Przy czym zastosowanie wodoru na szeroką skalę jest ograniczone przez koszty oraz wydajność obecnie stosowanych metod produkcji. Dlatego też prowadzone są intensywne badania nad nowymi technologiami otrzymywania wodoru ze źródeł odnawialnych.

Jednym z kierunków badań nad odnawialnymi metodami produkcji wodoru jest fotokatalityczna reakcja generowania wodoru, wykorzystująca energię promieniowania UV-Vis do inicjowania procesów zachodzących na powierzchni fotokatalizatora. Kluczowym czynnikiem wpływającym na efektywność tego procesu są właściwości zastosowanego materiału fotokatalitycznego, dlatego obecnie dużą uwagę poświęca się projektowaniu i badaniu nowych układów opartych m.in. na półprzewodnikach, nanocząstkach metali, kropkach kwantowych oraz szkieletach metaloorganicznych (MOFs)².

W ramach pracy opracowano serię kompozytowych fotokatalizatorów opartych na materiałach otrzymanych ze szkieletów metaloorganicznych. Prekursorami były bimetaliczne struktury MOFs zawierające w centrum metalicznym nikiel oraz cynk, które po przetworzeniu termicznym uległy transformacji do kompozytu bazowego ZnO/NiO. Następnie przeprowadzono modyfikację powierzchni materiałów przy użyciu różnej zawartości kropek kwantowych NiS₂. Właściwości otrzymanych fotokatalizatorów analizowano z wykorzystaniem metod charakteryzacji strukturalnej, morfologicznej i optycznej, natomiast ich potencjał aplikacyjny oceniono na podstawie efektywności fotokatalitycznego generowania wodoru.



Rys.1 Zdjęcie próbki NiS₂-ZnO/NiO_{0.3} wykonane za pomocą SEM

[1] Pathak, P. K., Yadav, A. K. & Kamwa, I. Green hydrogen: a strategic energy vector for achieving net-zero emissions by 2050. *Sustain. Energy Fuels* 9, 5285–5307 (2025). <https://doi.org/10.1039/D5SE00902B>

[2] Molaei, M. J. Recent advances in hydrogen production through photocatalytic water splitting: A review. *Fuel* 365, 131159 (2024). <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.131159>

Synteza nowych pochodnych tetrahydrochinolin-2,5-dionu i ich wykorzystanie w syntezie koniugatów peptydowych

[Daria Łada](#)¹, [Małgorzata Ryczkowska](#)², [Natalia Maciejewska](#)², [Natalia Ptaszyńska](#)¹, [Sławomir Makowiec](#)², [Krzysztof Rolka](#)¹

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

² Politechnika Gdańska, Wydział Chemiczny, 80-233 Gdańsk, ul. G. Narutowicza 11/12

daria.lada@phdstud.ug.edu.pl

Choć pochodne chinolonów są od dawna znane i szeroko wykorzystywane ze względu na swoje właściwości biologiczne (np. ciprofloksacyna, norfloksacyna, gemifloksacyna)^{1,2}, tetrahydrochinolin-2,5-dion wciąż stanowi stosunkowo niedoceniany układ heterocykliczny, o udokumentowanej aktywności przeciwdrobnoustrojowej oraz obiecujących właściwościach przeciwnowotworowych. Oferuje jednocześnie potencjał do dalszych modyfikacji strukturalnych³⁻⁵. W ostatnich latach obserwuje się wyraźny wzrost zainteresowania koniugatami, które łączą aktywność biologiczną peptydów o właściwościach przeciwdrobnoustrojowych (ang. *antimicrobial peptides*, AMP) lub peptydów penetrujących komórki (ang. *cell penetrating peptides*, CPP) z funkcjonalnością znanych leków małowcząsteczkowych. Kontynuując wcześniejsze, obiecujące badania prowadzone w Katedrze Biochemii Molekularnej nad peptydowymi koniugatami flukonazolu i lewofloksacyny, zdecydowaliśmy się rozszerzyć zakres prac o nową grupę związków – pochodne tetrahydrochinolin-2,5-dionu.

W minionym roku zsyntetyzowano kilka serii nowych pochodnych tetrahydrochinolin-2,5-dionu zróżnicowanych pod względem podstawników. Opracowano wieloetapową strategię ich syntezy oraz efektywnego wprowadzenia łącznika w postaci kwasu glutarowego, umożliwiającą koniugację otrzymanych pochodnych z peptydami na fazie stałej. Opracowaną metodykę zastosowano do syntezy koniugatu 30-FK16, w którym wybrana pochodna tetrahydrochinolin-2,5-dionu została kowalencyjnie połączona z *N*-końcową grupą aminową peptydu FK16.

Ocenę aktywności cytotoksycznej otrzymanych związków przeprowadzono wobec wybranych linii komórkowych prawidłowych i zmienionych nowotworowo. Wolny peptyd FK16 wykazywał wysoką aktywność wobec linii nowotworowych A549 ($IC_{50} = 0,29 \mu M$) i HCT116 ($IC_{50} = 2,76 \mu M$), przy jednoczesnej niskiej toksyczności wobec zdrowych fibroblastów MRC-5 ($IC_{50} > 100 \mu M$). Wolna pochodna tetrahydrochinolin-2,5-dionu (związek 30) wykazywała słabszą aktywność wobec linii komórkowych A549 ($IC_{50} = 22,80 \mu M$) i HCT116 ($IC_{50} = 26,83 \mu M$), przy jednoczesnej toksyczności wobec MRC-5 ($IC_{50} = 34,98 \mu M$). Koniugat 30-FK16 zachował wysoką aktywność cytotoksyczną wobec komórek nowotworowych A549 ($IC_{50} = 0,94 \mu M$) i HCT116 ($IC_{50} = 1,88 \mu M$) przy jednoczesnej aktywności wobec komórek prawidłowych MRC-5 ($IC_{50} = 4,21 \mu M$). Uzyskane wyniki wskazują na istotny wpływ koniugacji na profil aktywności i selektywności. Badania biologiczne są kontynuowane.

Finansowanie: Uniwersytet Gdański (BMN 539-T060-B184-25)

[1] Pham TDM, Ziora ZM, Blaskovich MAT. Quinolone antibiotics. *Medchemcomm*. 2019;10(10):1719-1739. doi:10.1039/c9md00120d

[2] Kan JY, Hsu YL, Chen YH, Chen TC, Wang JY, Kuo PL. Gemifloxacin, a fluoroquinolone antimicrobial drug, inhibits migration and invasion of human colon cancer cells. *Biomed Res Int*. 2013;2013:159786. doi:10.1155/2013/159786

[3] Ryczkowska M, Maciejewska N, Olszewski M, Witkowska M, Makowiec S. Design, synthesis, and biological evaluation of tetrahydroquinolinones and tetrahydroquinolines with anticancer activity. *Sci Rep*. 2022;12(1):9985. doi:10.1038/s41598-022-13867-x

[4] Ryczkowska M, Maciejewska N, Olszewski M, Witkowska M, Makowiec S. Tetrahydroquinolinone derivatives exert antiproliferative effect on lung cancer cells through apoptosis induction. *Sci Rep*. 2022;12:19076. doi:10.1038/s41598-022-23640-9

[5] Ryczkowska M, Trocka A, Hromova A, Makowiec S. Meldrum's acid assisted formation of tetrahydroquinolin-2-one derivatives a short synthetic pathway to the biologically useful scaffold. *Sci Rep*. 2024;14(1):487. doi:10.1038/s41598-023-50535-0

Molecular Dynamics and Quantum Mechanics-Based QSPR model for predicting diffusion coefficient in brownmillerite SOEC structures using internal charge separation as a descriptor

[Dawid Falkowski](#)^{1,2}, [Alicja Mikołajczyk](#)^{1,2}, [Piotr Skurski](#)^{1,2}, [Jakub Brzeski](#)^{1,2}, [Sher Ahmad](#)^{1,2,3}, [Tomasz Puzyn](#)^{1,2}

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

² QSAR Lab

³ Eindhoven University of Technology

dawid.falkowski@phdstud.ug.edu.pl

Doped brownmillerite oxides are emerging as promising oxygen electrode materials for solid oxide electrolysis cells. However, rational composition design remains challenging because oxygen transport is governed by interdependent defect chemistry, lattice distortions, and ion migration mechanisms. In this work, we introduce a data-efficient, *in silico* QSPR approach that links oxygen ion diffusion to a single quantum-chemical descriptor. Diffusion coefficients obtained from molecular dynamics simulations were used as the target property, while internal charge separation (Π), calculated quantum-chemically, was employed as the only explanatory variable¹.

The resulting linear model is transparent, predictive, and constrained by a well-defined applicability domain. It is consistent with central OECD principles for (Q)SAR modelling, including a clearly specified endpoint, an explicit algorithm, domain definition, and predictivity evaluation supported by mechanistic reasoning². The observed negative correlation between Π and diffusion coefficient indicates that stronger internal charge separation enhances electrostatic stabilization of O^{2-} ions and makes the migration energy landscape in vacancy-channel structures more rugged. This increases the effective migration barrier and consequently reduces oxygen ion diffusivity. Overall, the proposed workflow advances SSbD-oriented digital materials design by enabling fast, computation-guided screening and prioritization of candidate compositions³.

[1] D. Falkowski, A. Mikołajczyk, P. Skurski, J. Brzeski, and T. Puzyn, "Machine learning-driven SSbD strategy for discovering next-generation anodes in solid oxide electrolysis cells," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 228, Apr. 2026, doi: 10.1016/j.ijhydene.2026.154543.

[2] Organisation for Economic Co-operation and Development, "(Q)SAR Assessment Framework: Guidance for the regulatory assessment of (Quantitative) Structure Activity Relationship models and predictions," OECD Publishing, Paris, Nov. 2024. doi: 10.1787/bbdac345-en.

[3] S. Ahmad, D. Emmery, F. Gallucci, and J. van der Schaaf, "Neural network based molecular dynamics simulations for oxide ion transport in solid oxide electrolysis cell materials," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 180, p. 151714, Oct. 2025, doi: 10.1016/J.IJHYDENE.2025.151714.

Modyfikowane, rozgałęzione polimery kwasu L-2,3-diaminopropionowego (DAP) jako nietoksyczne odczynniki transfekcyjne

Gabriela Mirecka, Adam Lesner, Magdalena Wysocka

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

gabriela.mirecka@phdstud.ug.edu.pl

Opracowanie bezpiecznych i wydajnych systemów transportu materiału genetycznego (DNA lub RNA) do komórek eukariotycznych jest jednym z głównych wyzwań współczesnej terapii genowej. Wektory wirusowe, mimo wysokiej skuteczności, mogą wywoływać odpowiedź immunologiczną i powodować integrację insercyjną, co ogranicza ich zastosowanie kliniczne. Alternatywą są dendrymery, silnie rozgałęzione polimery o trójwymiarowej, dobrze zdefiniowanej strukturze. Obecność na ich powierzchni dodatnio naładowanych grup guanidynowych umożliwia wiązanie ujemnie naładowanych kwasów nukleinowych oraz ułatwia transport powstałych kompleksów przez błonę komórkową. Wykorzystanie bloków budulcowych DAPEG (kwas L-2,3-diaminopropionowy (DAP) modyfikowany sfunkcjonalizowanymi resztami glikolu polietylenowego (PEG)) pozwala konstruować nietoksyczne i wydajne odczynniki transfekcyjne¹⁻³.

Celem pracy była weryfikacja hipotezy, iż dendrymery DAPEG modyfikowane na N-końcu resztami kwasów tłuszczowych o różnej długości łańcucha (etanowego, butanowego i heksanowego) oraz resztami histydyny efektywnie wiążą i dostarczają materiał genetyczny do komórek docelowych, przy minimalnej cytotoksyczności.

Zsyntezowane dendrymery oceniono pod kątem zdolności wiązania DNA, ochrony kwasów nukleinowych przed degradacją, cytotoksyczności wobec linii HEK 293T (test CellTiter Glo 3D) oraz efektywności transfekcji mierzonej aktywnością lucyferazy (RLU). Analizę prowadzono dla kompleksów dendrymer–DNA o stosunkach ładunkowych N/P 1,5:1; 3:1 oraz 9:1.

Uzyskane wyniki wskazują, że dendrymery DAPEG modyfikowane resztami kwasów tłuszczowych i histydyny stanowią obiecujące, niewirusowe wektory do dostarczania materiału genetycznego do komórek eukariotycznych.

Badania zostały sfinansowane w ramach grantu 539-T070-B251-26 BMN realizowanego na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego

[1] Dufès C, Uchegbu IF, Schätzlein AG. Dendrimers in gene delivery. *Advanced Drug Delivery Reviews*. 2005;57(15):2177-2202. doi:10.1016/j.addr.2005.09.017

[2] Clima L, Peptanariu D, Pinteala M, Salic A, Rotaru A. Dendritic architectures as non-viral gene delivery vectors: challenges and perspectives. *Polymers (Basel)*. 2018;10(6):633. doi:10.3390/polym10060633

[3] Shcharbin DG, Bryszewska M. Dendrimers in gene transfection. *Biochemistry (Mosc)*. 2009;74(11):1183-1193. doi:10.1134/S0006297909110010

Konstrukcja i zastosowanie bionanocząstek nowej generacji w technologiach medycznych

Jakub Mazur, Agnieszka Żylicz-Stachula, Joanna Żebrowska, Piotr Skowron

Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Biotechnologii Molekularnej Wita Stwosza 63 80-308, Gdańsk

jakub.mazur@phdstud.ug.edu.pl

Białka bakteriofagowe są coraz częściej badaną grupą białek. Szczególnym zainteresowaniem cieszą się białka budujące kapsyd wirusa. Ze względu na ich zdolność do tworzenia samoorganizujących się struktur białka te można wykorzystać do konstrukcji bionanocząstek. Takie struktury nie zawierają materiału genetycznego i mogą być modyfikowane metodami inżynierii genetycznej, aby pełniły rolę nośnika leku¹.

Białko portalowe jest jednym z białek budujących kapsyd bakteriofaga. Białko to samoorganizuje się tworząc multimeryczny pierścień, przez którego wnętrze może się przemieszczać DNA np. podczas infekcji komórki bakteryjnej².

Układ SpyTag/SpyCatcher jest systemem łącznikowym, umożliwiającym połączenie się domen SpyCatcher i SpyTag. System został skonstruowany poprzez modyfikacje domeny białka membranowego pochodzącego z *Streptococcus pyogenes*. Domena nazwana SpyCatcher jest w stanie rozpoznać i związać się kowalencyjnie z krótkim 13-aminokwasowym peptydem SpyTag. Modyfikując metodami inżynierii genetycznej rekombinowane białka tak, aby na swojej powierzchni eksponowały kompatybilne domeny łącznika, umożliwia się późniejsze podłączenie obu białek do siebie³.

Celem badań było zaprojektowanie i skonstruowanie modelu bionanocząstek opartych na: (i) Białku portalowym pochodzącym od termofilnego bakteriofaga TP-84, które eksponuje na swojej powierzchni fragment SpyTag, (ii) Białku zielonej fluorescencji zawierającym komplementarny fragment SpyCatcher. Rekombinowane białka nadprodukowano i oczyszczono. Wyznaczono optymalne metody oczyszczania skonstruowanych w projekcie białek. Przeprowadzono testy oddziaływania między kompatybilnymi parami białek z wykorzystaniem technik immunodetekcji.

Rekombinowane białko zielonej fluorescencji działa jako białko reporterowe, które w projekcie służy do weryfikacji działania platformy. W późniejszych etapach projektu białko reporterowe zostanie zastąpione innym, biologicznie aktywnym białkiem eksponującym domenę SpyCatcher.

[1] Ikwuagwu B, Tullman-Ercek D. Virus-like particles for drug delivery: a review of methods and applications. Curr Opin Biotechnol. 2022;78:102785. doi:10.1016/j.copbio.2022.102785.

[2] Dedeo CL, Cingolani G, Teschke CM. Portal Protein: The Orchestrator of Capsid Assembly for the dsDNA Tailed Bacteriophages and Herpesviruses. Annu Rev Virol. 2019;6(1):141-160. doi:10.1146/annurev-virology-092818-015819

[3] Hatlem D, Trunk T, Linke D, Leo JC. Catching a SPY: Using the SpyCatcher-SpyTag and Related Systems for Labeling and Localizing Bacterial Proteins. Int J Mol Sci. 2019;20(9):2129. Published 2019 Apr 30. doi:10.3390/ijms20092129

Nanomaszynieria komórkowa: struktura i funkcja pierścieni L i P motorów molekularnych

[Kacper Kępka](#), [Artur Giełdoń](#)

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

kacper.kepka@phdstud.ug.edu.pl

Bakterie poruszają się na różne sposoby, a u wielu gatunków ruch umożliwiają wici napędzane przez wyspecjalizowany motor molekularny¹. Co więcej, wic może być również narzędziem do penetracji błony komórkowej, komórek zaatakowanego organizmu. Ten mechanizm wykorzystują bakterie *Helicobacter pylori*². Wic jest zbudowana z wielu białek, które łączą się w strukturę filamentu o długości od kilkunastu do kilkudziesięciu mikrometrów³. Za ruch obrotowy wici odpowiada wyspecjalizowany motor wiciowy. To złożona struktura białkowa działająca na zasadzie zbliżonej do silnika elektrycznego. Motory wici zasilane są na dwa sposoby: gradient jonowy (najczęściej protonowy, ale również na sodowy) oraz ATP. Uzyskana energia potencjalna jest następnie zamieniana na energię kinetyczną – stator napędza rotor, do którego, za pomocą haka, przyczepiona jest wic. Stator składa się z 18 podjednostek, tworzących pierścienie otaczające dolną część rotora - switch complex. Switch complex zbudowany jest z pierścienia C oraz pierścienia MS. Oba z nich mają 34-krotną symetrię, a cały switch complex zbudowany jest z 4 typów białek. Jego rolą jest zmiana kierunku obrotu rotora. Switch complex połączony jest z hakiem za pomocą wału (rod). Motor osadzony jest na błonie/błonach biologicznych oraz na ścianie komórkowej. W celu zapewnienia swobody ruchu rotora, na wysokości pręta, umiejscowione jest łożysko w formie pierścieni L i P. Są to 26 merowe struktury czwartorzędowe, które oddziałują ze sobą⁴. Zbudowane są one z dwóch rodzajów białek: FlgH (pierścień L) oraz FlgI (pierścień P)⁵.

Przez długi czas podstawowym narzędziem umożliwiającym poznanie struktury motorów molekularnych pozostawała mikroskopia krioelektronowa (cryo-EM). W ostatnich latach sytuacja ta zaczęła się jednak zmieniać dzięki rozwojowi metod obliczeniowych, takich jak AlphaFold3⁶. Dzięki nim możliwa jest budowa pełno-atomowych modeli.

W swojej pracy zbudowałem pierścienie L i P z użyciem map cryo-EM o niskiej rozdzielczości atomowej. Podczas badań zbudowałem modele pierścieni L i P dla czterech bakterii: *Salmonella typhimurium*, *Vibrio cholerae*, *Campylobacter jejuni* oraz *Helicobacter pylori*. Modele dobrze wpisują się w mapy cryo-EM oraz pozwolą na pełną konstrukcję bakteryjnych motorów molekularnych.

[1] Josenhans, C.; Suerbaum, S. The role of motility as a virulence factor in bacteria. *Int. J. Med. Microbiol.* 2002, 291, 605–614

[2] Rosinke, K.; Tachiyama, A.; Mrásek, J.; Liu, J.; Hoover, T. A *Helicobacter pylori* flagellar motor accessory is needed to maintain the barrier function of the outer membrane during flagellar rotation. *PLOS Pathogens*. 2024, 21(1): e1012860

[3] DeRosier, D. J. The turn of the screw: The bacterial flagellar motor. *Cell* 93, 17–20

[4] Yamaguchi, T.; Makino, F.; Miyata, T.; Minamino, T.; Kato, T.; Namba, K. Structure of the molecular bushing of the bacterial flagellar motor. *Nat Commun.* 2021. 12: 4469-4469

[5] Drobnič, T et al. Molecular model of a bacterial flagellar motor in situ reveals a "parts-list" of protein adaptations to increase torque. *BioRxiv* 2024

[6] Abramson, J., Adler, J., Dunger, J., et al. "Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3." *Nature* (2024).

Nowo zsyntezowane związki koordynacyjne niklu(II), kobaltu(II), rodu(III) i rodu(IV): zależność między strukturą krystaliczną, właściwościami fizykochemicznymi oraz aktywnością katalityczną

[Kacper Pobłocki](#)⁴, Marzena Białek¹, Katarzyna Jarzemska², Radosław Kamiński², Łukasz Ponikiewski³, Dagmara Jacewicz⁴

¹ Uniwersytet Opolski, Wydział Chemii i Farmacji, 45-052 Opole, ul. Oleska 48

² Uniwersytet Warszawski, Wydział Chemii, 02-089 Warszawa, ul. Żwirki i Wigury 101

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

⁴ Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63

kacper.poblocki@phdstud.ug.edu.pl

Rosnące zapotrzebowanie na wysoce aktywne, selektywne i stabilne kinetycznie katalizatory (ko)polimeryzacji olefin koreluje z projektowaniem i syntezą nowych układów katalitycznych. Szczególnie interesujące wydają się związki koordynacyjne oparte na jonach metali grup 8–11 układu okresowego tj. Ni(II), Co(II) lub Rh(III) ze względu na niską oksofilowość, przekładającą się na większą tolerancję polarnych grup funkcyjnych (ko)monomerów¹⁻³.

Celem badań była synteza pięciu nowych związków koordynacyjnych niklu(II), kobaltu(II) i rodu(III/IV) zawierających w strukturze krystalicznej ligandy karboksylanowe, pirydynowe lub 1,10-fenantrolinę oraz określenie ich struktur krystalicznych metodą monokrystalicznej dyfrakcji rentgenowskiej (ang. *single-crystal XRD*). Przeprowadzono również badania właściwości fizykochemicznych z wykorzystaniem miareczkowania potencjometrycznego i konduktometrycznego w celu wyznaczenia wartości stałych trwałości kompleksów. Ponadto oceniono aktywność katalityczną nowo zsyntetyzowanych związków koordynacyjnych w procesie oligomeryzacji monomerów polarnych (np. akrylanu metylu) i (ko)polimeryzacji α -olefin (tj. etylen, okt-1-en, heks-1-en).

Badane układy katalityczne wykazywały aktywność katalityczną od umiarkowanej do wysokiej ($10^2 - 10^5 \text{ g} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$), zależną od rodzaju centrum metalicznego, środowiska koordynacyjnego oraz zastosowanego kokatalizatora (chlorku dietyloglinu, metyloaluminoksanu lub dichlorku etyloglinu). Badania potencjometryczne wykazały szeroki zakres trwałości termodynamicznej otrzymanych kompleksów ($\log \beta = 14,2 - 47,9$), potwierdzając istotny wpływ geometrii koordynacyjnej, efektu chelatowego i rodzaju ligandów donorowych na stabilność badanych układów.

Uzyskane wyniki wskazują, że otrzymane kompleksy mogą stanowić obiecującą platformę do projektowania nowych układów katalitycznych, charakteryzujących się zwiększoną tolerancją wobec monomerów polarnych, możliwością kontrolowania mikrostruktury i właściwościami fizykochemicznymi otrzymywanych makromolekuł.

Projekt finansowany ze środków Ministra Edukacji i Nauki w ramach Programu Perły Nauki nr. projektu PN/01/0137/2022

[1] Pobłocki, K., Ponikiewski, Ł., Białek, M., Jacewicz, D. Insight into new crystal structures of nickel (II) and cobalt (II) complexes: catalytic and physicochemical properties. *Polyhedron*, 2026; 289: 118025. doi: 10.1016/j.poly.2026.118025

[2] Guo, L., Liu, W., Chen, C. Late transition metal catalyzed α -olefin polymerization and copolymerization with polar monomers. *Mater. Chem. Front.* 2017; 1(12): 2487-2494. doi 10.1039/C7QM00321H

[3] Medina, J. T., Tran, Q. H., Ramachandru, G. G., Brookhart, M., Daugulis, O. Late Metal Sandwich Catalysts for Olefin Polymerization. *Acc. Chem. Res.* 2025; 58(17): 2770-2780. doi:10.1021/acs.accounts.5c00440

Ocena zdolności predykcyjnych modeli fundamentalnych w zakresie przenikania przez barierę krew–mózg (BBB)

[Kamil Antoszewski](#), *Tomasz Puzyn*

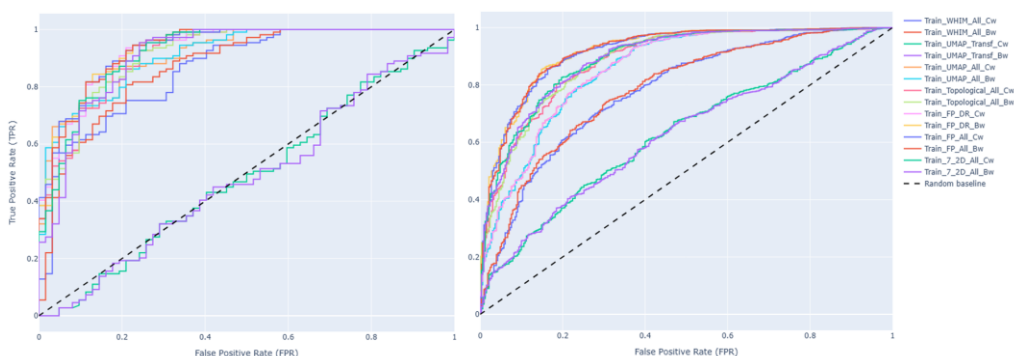
Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Chemii i Radiochemii Środowiska, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63

kamil.antoszewski@phdstud.ug.edu.pl

Bariera Krew Mózg (BBB) stanowi największe wyzwanie podczas projektowania nowych małowcząsteczkowych leków. Zarówno zdecydowana większość leków jak i ogólnie określanych związków chemicznych jest sukcesywnie zatrzymywana przez BBB. Ta cecha charakterystyczna bariery jest szczególnie istotna dla ludzi, ponieważ stanowi zarazem ostatnią jak i najtrudniejszą barierę w ludzkim organizmie przed przedostaniem się związków chemicznych do mózgu wywołując tym neurotoksyczność. Jednakże stanowi to bardzo duże wyzwanie podczas projektowania leków spełniających zadaną funkcję, oraz zdolnych do jednoczesnego przenikania do mózgu¹⁻².

Według szacunków 80% wszystkich związków chemicznych nie jest w stanie przenikać BBB, co stanowi wyzwanie podczas projektowania leków. Szczególnym utrudnieniem tego zadania jest fakt iż w dostępnej literaturze z pośród wszystkich badanych związków 80% z nich została zaklasyfikowana jako zdolne do przenikania bariery. Oznacza to, że tworzone modele predykcyjne są od początku skazane na sukces wynikający z niezbalansowanego zbioru danych. Modele predykcyjne są z kolei niezbędne do wstępnego screeningu potencjalnych kandydatów na leki, co zachęca do tworzenia coraz bardziej zaawansowanych modeli klasyfikacyjnych. Zaproponowany przez IBM w 2024 roku model fundamentalny jest największym, najbardziej skomplikowany i najbardziej zaawansowanym modelem głębokiego uczenia maszynowego jaki powstał na potrzeby rozwiązywania problemów chemicznych³. Wspomniany model fundamentalny pozwolił osiągnąć skuteczność ROC-AUC = 0.91, jednakże kosztem tak wysokiej dokładności jest zerowa interpretowalność modelu, przez występujący w nim aspekt Black-Box.

Powyższe zagadnienie skłoniło nas do przygotowania prostszego modelu klasycznego uczenia maszynowego, aby zwiększyć interpretowalność modeli bez konieczności przyjmowania za pewnik wyniku jaki wygenerują. Stworzony w tym badaniu model Lasów Losowych (Random Forest) bazujący na najprostszych z dostępnych deskryptorów chemicznych jakim są Finger Printy uzyskał skuteczność na poziomie ROC-AUC = 0.91-0.93 tym samym nie tylko dorównując ale i przewyższając model fundamentalny.



Rys. 1. Porównanie zdolności predykcyjnych modeli Lasów losowych z modelem fundamentalnym

Praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Nauki w ramach projektu NanoCARRIERS (ID: 2021/40/Q/ST5/00117)

[1] Lombardo, Sonia M., et al. "Key for crossing the BBB with nanoparticles: the rational design." *Beilstein journal of nanotechnology* 11.1 (2020): 866-883.

[2] Wu, Di, et al. "The blood–brain barrier: Structure, regulation and drug delivery." *Signal transduction and targeted therapy* 8.1 (2023): 217.

[3] Soares, Eduardo, et al. "SMI-TED: A large-scale foundation model for materials and chemistry." (2024).

Conjugates of OGF analogs with topoisomerase II inhibitors as an innovative approach in targeted pancreatic cancer therapy

Kamil Klimkowski¹, Klaudia Kubiak², Marcin Banacki², Magdalena Ślusarz³, Marlena Zyśk⁴,
Iwona Inkielewicz-Stępnia², Elżbieta Jankowska¹

¹ University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, Department of Biomedical Chemistry, Wita Stwosza 63, 80–308 Gdańsk, Poland

² Medical University of Gdańsk, Faculty of Pharmacy, Department and Division of Pharmaceutical Pathophysiology, Dębinki, 80–211 Gdańsk, Poland

³ University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, Department of Theoretical Chemistry, Wita Stwosza 63, 80–308 Gdańsk, Poland

⁴ Medical University of Gdańsk, Department of Clinical Biochemistry, Dębinki 7, 80-211, Gdańsk, Poland

kamil.klimkowski@phdstud.ug.edu.pl

Pancreatic ductal adenocarcinoma (PDAC) is one of the most significant challenges in modern oncology due to its high mortality, aggressive progression, and limited therapeutic options. The five-year survival rate for patients is only 5–6%. The main barriers to effective treatment include late diagnosis, increasing drug resistance, and the systemic toxicity of conventional chemotherapy. A promising strategy involves the use of opioid growth factor (OGF), which regulates cell proliferation homeostasis through the OGF-OGFr axis, arresting the cell cycle in the G1/S (G0/G1) phase. However, the short half-life of the native peptide in plasma limits its clinical application. Concurrently, topoisomerase II (Top II) remains a key therapeutic target, as its inhibition leads to irreversible DNA damage and the induction of apoptosis^{1–5}

The aim of this project is to develop new, proteolytically stable conjugates combining two mechanisms of action: inhibition of proliferation by OGF analogs and the cytotoxic effect of Top II inhibitors. In the designed constructs, the OGF analog serves as a targeting peptide that binds to the OGFr receptor on the nuclear membrane, selectively delivering a topoisomerase II inhibitor connected via a cleavable linker.

The conducted research included analytical characterization, stability tests in human plasma, and evaluation of biological activity in 2D and 3D cell models. Molecular modeling enabled the determination of the spatial arrangement of the constructs and the correlation of their conformation with the obtained biological results. Preliminary results revealed an extended half-life for selected analogs and high anticancer efficacy of the conjugates, making them promising candidates for the development of innovative and more selective PDAC therapies.

The project is carried out as part of the Young Scientists' Research Project No. BMN 539-T070-B182-25, and No. UGrants–START 533-BG20-GS2A-26

[1] McLaughlin P.J., Zagon I.S., Biochemical Pharmacology, 2012, 84, 746-755.

[2] Shim N., et al., Biomaterials, 2022, 289, 121806.

[3] Swedan H.K., et al., Bioorganic Chemistry, 2023, 136, 106548.

[4] Wang R., et al., International Immunopharmacology, 2019, 75, 105785.

[5] Fief C., et al., ACS Omega, 2019, 4, 4049-4055.

Fluorescent labelling and functionalization of cell-penetrating peptides Tat(47-57) and TP10

[Katarzyna Prochera](#), [Jarosław Ruczyński](#)

Laboratory of Chemistry of Biologically Active Compounds, Faculty of Chemistry, University of Gdańsk, Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk, Poland

katarzyna.prochera@phdstud.ug.edu.pl

Cell-penetrating peptides (CPPs) are a group of short biologically active peptides that have the ability to cross biological membranes without damaging them. They can also transport various biologically active molecules into the cell interior, therefore, they are often referred to as “Trojan horse” carriers. These unique properties of CPPs make them excellent candidates for conjugation with different molecules in order to enhance their bioavailability and thereby modulate their activity^{1,2}.

This strategy has proven particularly effective in improving the activity of vancomycin (Van) – a glycopeptide antibiotic that is gradually losing its efficacy due to increasing bacterial resistance, mainly among staphylococcal and enterococcal strains. In our recent studies, we synthesized and evaluated a series of Van-CPP conjugates that exhibited significantly enhanced antimicrobial activity against both clinical and drug-resistant bacterial strains, as well as reduced cytotoxicity in comparison to unmodified Van. The peptides that showed the strongest effect on Van’s activity were Tat(47-57) and TP10, which also exhibit antimicrobial activity on their own².

These promising findings encourage further investigation into the mechanisms of conjugates’ transport into bacterial cells. One of the approaches enabling these studies is fluorescent labelling of the peptides³. In our current studies, we synthesized and physicochemically characterized fluorescently labelled Tat(47-57) and TP10. The modification was achieved by introducing 5(6)-carboxyfluorescein into the peptide side chain. The peptides were also functionalized with a propiolate group at the *N*-terminus to enable further conjugation with azide-functionalized Van derivatives *via* “click” reaction.

Fluorescent labelling of the peptides will allow investigation of cellular localization and internalization processes using fluorescence-based techniques and may provide insight into their mechanism of action. The studies constitute an important stage in the development of new Van-CPP conjugates and the optimization of their properties as potential agents for antibacterial therapies.

This research is a part of the project „Synteza znakowanych fluorescencyjnie koniugatów peptydów penetrujących komórki z wankomycyną” funded by University of Gdańsk (BMN 539-T060-B282-26)

[1] Gallo M, Defaus S, Andreu D. 1988–2018: Thirty years of drug smuggling at the nano scale. Challenges and opportunities of cell-penetrating peptides in biomedical research. *Arch Biochem Biophys*. 2019;661:74–86. doi:10.1016/j.abb.2018.11.010

[2] Ruczyński J, Prochera K, Kaźmierczak N, Kosznik-Kwaśnicka K, Piechowicz L, Mucha P, Rekowski P. New Conjugates of Vancomycin with Cell-Penetrating Peptides—Synthesis, Antimicrobial Activity, Cytotoxicity, and BBB Permeability Studies. *Molecules*. 2024;29(23):5519. doi:10.3390/molecules29235519

[3] Ruczyński J, Rusiecka I, Turecka K, Kozłowska A, Alenowicz M, Gągało I, Kawiak A, Rekowski P, Waleron K, Kocić I. Transportan 10 improves the pharmacokinetics and pharmacodynamics of vancomycin. *Sci Rep*. 2019; 9: 3247. doi:10.1038/s41598-019-40103-w

Analiza zawartości ^{210}Po i izotopów uranu w składnikach środowiska poeksploatacyjnego w Sudetach

[Klaudia Lanczewska-Bejenka](#), Alicja Boryło, Bogdan Skwarzec

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

klaudia.lanczewska@phdstud.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. Próbkę 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.

[1] Atwood D.A., Radionuclides in environment, Wiley, UK, 2010

[2] Burns P.C., Finch P., Uranium: Mineralogy, Geochemistry and the Environment, MSA, Washington 1999

[3] Skwarzec B., Radiochemical methods for the determination of polonium, radiolead, uranium and plutonium in the environmental samples, *Chemia Analityczna* (Warsaw), 42:107-115, 1997

[4] Smakowski T., Wołowicz S., Miecznik J. B., Możliwe źródła zaopatrzenia w paliwo potencjalnych elektrowni jądrowych w Polsce (Possible sources of nuclear fuel supply for potential nuclear power plants in Poland), *Zeszyty Naukowe Instytutu Gospodarki Surowcami Mineralnymi Polskiej Akademii Nauk*, 85:295-307, 2013

Analiza zasad nukleinowych z użyciem utlenionych powierzchniowo elektrod CB-PLA

Kornelia Kozłowska-Wysocka, Paweł Niedziałkowski

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

kornelia.kozlowska@phdstud.ug.edu.pl

Druk 3D, nazywany również produkcją addytywną, znajduje szerokie zarówno w wielu gałęziach przemysłu, jak i w środowisku akademickim. Drukowane elektrody, stanowiące ekonomiczną alternatywę dla tradycyjnych materiałów elektrodowych, w ostatnich latach znacząco przyczyniły się do rozwoju metod elektrochemicznych. Spośród dostępnych technologii wytwarzania addytywnego szczególne zainteresowanie wzbudza technika osadzania topionego materiału (FDM) wykorzystująca do produkcji elektrod biodegradowalny kwas polimlekowy (PLA). Ponieważ polimer ten jest izolatorem, do celów elektrochemicznych stosuje się kompozyty z przewodzącymi dodatkami, takimi jak sadza (CB-PLA). Choć obecność tych materiałów zwiększa przewodnictwo elektryczne, gotowe elektrody wymagają aktywacji powierzchni. Dopiero częściowe wytrawienie zewnętrznych warstw polimeru odsłania wypełniacz węglowy, znacząco poprawiając parametry elektrochemiczne układu^{1,2}.

Głównym celem niniejszych badań było zoptymalizowanie procedury utleniania powierzchni drukowanych elektrod CB-PLA. Proces ten wprowadza tlenowe grupy funkcyjne (karboksylowe, hydroksylowe lub epoksydowe), wykorzystywane w detekcji zasad nukleinowych. Charakterystykę elektrochemiczną przeprowadzono za pomocą woltamperometrii cyklicznej (CV), różnicowej woltamperometrii impulsowej (DPV) oraz elektrochemicznej spektroskopii impedancyjnej (EIS). Elektrody utleniane wykazały znacznie wyższą czułość i selektywność wobec zasad nukleinowych (adeniny, guaniny, cytozyny i tyminy) w porównaniu do materiału nieaktywowanego. Poprawa właściwości analitycznych umożliwia precyzyjne wykrywanie DNA w diagnostyce molekularnej i biosensorach. Tanie i proste w wytwarzaniu elektrody 3D stanowią doskonałą alternatywę dla konwencjonalnych platform w szybkich testach przenośnych.

[1] A. Koterwa, I. Kaczmarzyk, S. Mania, M. Cieślík, R. Tylingo, T. Ossowski, R. Bogdanowicz, P. Niedziałkowski, J. Ryl, Appl. Surf. Sci., 2021, 574, 0169-4332.

[2] K. Kozłowska, M. Cieślík, A. Koterwa, K. Formela, J. Ryl, P. Niedziałkowski, Materials, 2024, 17, 2833.

Synteza i badania pętli wiążących rodziny czynników wzrostu PDGF i VEGF jako nowy typ stymulatorów gojenia ran

Krzysztof Polaczek¹, Małgorzata Zawrzykraj², Milena Deptuła², Michał Piśkuła², Artur Giełdoń¹,
Emilia Sikorska¹, Przemysław Karpowicz¹

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

² Gdański Uniwersytet Medyczny, Pracownia Inżynierii Tkankowej i Medycyny Regeneracyjnej, 80-211 Gdańsk ul. Dębinki 1

krzysztof.polaczek@phdstud.ug.edu.pl

Rany przewlekłe stanowią narastający problem kliniczny i społeczno-ekonomiczny, szczególnie w kontekście starzenia się populacji, cukrzycy oraz innych chorób zaburzających prawidłową regenerację tkanek¹. Jednym z elementów utrudniających gojenie są zaburzenia w dostępności i aktywności czynników regulujących proliferację, migrację i różnicowanie komórek. Do kluczowych regulatorów tych procesów należą m.in. płytkopochodny czynnik wzrostu PDGF oraz czynnik wzrostu śródbłónki naczyń VEGF, zaangażowane w aktywację komórek skóry, angiogenezę oraz przebudowę nowo powstającej tkanki. Chociaż pełne białka wykazują wysoki potencjał biologiczny, ich zastosowanie terapeutyczne ograniczają koszty otrzymywania, ograniczona stabilność oraz trudność w kontrolowaniu aktywności². Skutkuje to coraz większym zainteresowaniem krótkimi peptydami projektowanymi na podstawie sekwencji pętli odpowiedzialnych za oddziaływanie PDGF i VEGF z receptorami.

We wcześniejszym etapie badań peptydy oparte na pętlach wiążących PDGF i VEGF poddano przesiewowej ocenie powinowactwa receptorowego oraz aktywności proliferacyjnej, co pozwoliło wytypować najbardziej obiecujące związki do pogłębionej charakterystyki. Dla wybranych peptydów wykonano pomiary metodą MST, umożliwiające wyznaczenie stałych wiązania dla oddziaływań z receptorami PDGFR α , PDGFR β , VEGFR1 i VEGFR2, a także ocenę ich stabilności w ludzkim osoczu. Badania te pozwalają zweryfikować, czy aktywność obserwowana w testach przesiewowych znajduje odzwierciedlenie w ilościowo mierzalnym powinowactwie do receptorów oraz trwałości w środowisku biologicznym. Równolegle, na podstawie modelowania molekularnego, zaproponowano modyfikacje sekwencji mające potencjalnie zwiększyć powinowactwo wybranych peptydów do receptorów. W celu eksperymentalnej weryfikacji tych założeń wytypowano jeden peptyd modelowy, charakteryzujący się korzystną aktywnością proliferacyjną, lecz słabym wiązaniem receptorowym w testach przesiewowych. Następnie otrzymano jego analogi zawierające pojedyncze lub podwójne podstawienia wybranych reszt aminokwasowych, a ich zdolność do oddziaływania z receptorami oceniono za pomocą zmodyfikowanego testu ELISA.

Uzyskane wyniki pozwalają dokładniej określić profil wiązania receptorowego wybranych peptydów, ocenić ich trwałość w środowisku biologicznym oraz wstępnie określić wpływ poszczególnych reszt aminokwasowych na oddziaływanie z receptorami. Całość badań stanowi kolejny etap racjonalnej selekcji i optymalizacji peptydów projektowanych jako potencjalne związki wspomagające gojenie ran przewlekłych.

Badania finansowane ze środków NCN w ramach projektu SONATA 19 nr 2023/51/D/NZ7/02791

[1] Falanga V, Isseroff RR, Soulika AM, et al. Chronic wounds. Nat Rev Dis Primers. 2022;8(1):50. Published 2022 Jul 21. doi:10.1038/s41572-022-00377-3

[2] Barrientos S, Brem H, Stojadinovic O, Tomic-Canic M. Clinical application of growth factors and cytokines in wound healing. Wound Repair Regen. 2014;22(5):569-578. doi:10.1111/wrr.12205

Solar-Driven CO₂ Valorization to Formic Acid over NH₂-MIL-125@ZIF-8 Heterostructures

[Maciej Hiller](#), Paweł Mazierski, Adriana Zaleska-Medynska

University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, 80-308, Gdańsk, Wita Stwosza 63

maciej.hiller@phdstud.ug.edu.pl

The transformation of carbon dioxide into value-added chemical fuels, such as formic acid, represents a profitable perspective in sustainable chemistry, offering a dual solution to mitigation of CO₂ emissions and usage of sun being renewable energy source^{1,2}. While Metal-Organic Frameworks (MOFs) are promising candidates as photocatalysts for CO₂ photoconversion, unmodified often suffer from a functional trade-off: those with high CO₂ adsorption capacities frequently lack the properties required for efficient photocatalysts. This research explores a hybrid approach by proposing NH₂-MIL-125@ZIF-8 composites. The goal is to create a synergistic heterostructure that couples the visible-light-driven photocatalytic activity of the titanium-based NH₂-MIL-125³ with the exceptional CO₂ capturing and concentrating abilities of a ZIF-8⁴.

Various synthesis strategies were evaluated to control the growth of the ZIF component on the MIL surface and to obtain materials with uniform morphology in a reproducible manner. These adjustments focused on the selection of solvents, the proportions of metallic and organic precursors, and control over experimental parameters such as temperature and stirring. This resulted in four primary variants, selected for further research. Physicochemical characterization including pXRD, BET for surface area and CO₂ sorption analysis, and SEM/TEM with EDS mapping confirmed the successful formation of core-shell and core-satellite architectures. The 2xZn (increased metal to linker ratio) variant exhibited the highest porosity, it was the 2x2-MIM (increased linker to metal ratio) composite that demonstrated the most significant enhancement in photocatalytic performance, improving the photoactivity of pristine NH₂-MIL-125.

To confirm the validity of the photocatalytic mechanism, the most efficient sample, 2x2-MIM, underwent isotopic testing. The use of ¹³-labeled CO₂ combined with GC-MS analysis provided evidence that the formic acid produced originated directly from the gaseous substrate rather than from framework degradation or impurities. Additionally, action spectra analysis conducted between 400 and 600 nm light wavelengths, showed that the photoactivity at 440 nm aligns with the material's DRS UV-Vis absorption profile. These findings suggest that the 2x2-MIM sample synthesis creates an optimized interface that facilitates efficient charge transfer and substrate concentration, demonstrating that the MOF-MOF composite materials are a powerful tool for advancing solar-to-fuel conversion technologies.

The study was conducted under funding received from the National Science Centre of Poland via OPUS 23 project "Design and synthesis of multicomponent metal-organic framework heterostructures for efficient and selective CO₂ photoconversion into valuable fuels and chemicals" UMO-2022/45/B/ST4/01138

-
- [1] He, B., Wang, Y.-J., Bai, X., Bian, H., Xie, Y., Li, R., & Li, J.-R. (2024). Rational construction of MOF-on-MOF heterojunction with an array of flexible two-dimensional microsheets for efficient CO₂ photoreduction. *Chemical Engineering Journal*, 482, 149000. doi:10.1016/j.cej.2024.149000
- [2] Hepburn, C., Adlen, E., Beddington, J., Carter, E. A., Fuss, S., Mac Dowell, N., Minx, J. C., Smith, P., & Williams, C. K. (2019). The technological and economic prospects for CO₂ utilization and removal. *Nature*, 575(7781), 87–97. doi:10.1038/s41586-019-1681-6
- [3] Cheng, X.-M., Dao, X.-Y., Wang, S.-Q., Zhao, J., & Sun, W.-Y. (2020). Enhanced Photocatalytic CO₂ Reduction Activity over NH₂-MIL-125(Ti) by Facet Regulation. *ACS Catalysis*, 11(2), 650–658. doi:10.1021/acscatal.0c04426
- [4] Elaoui, A., El Ouardi, M., Zbair, M., BaQais, A., Saadi, M., & Ait Ahsaine, H. (2022). ZIF-8 metal organic framework materials as a superb platform for the removal and photocatalytic degradation of organic pollutants: a review. *RSC Advances*, 12(49), 31801–31817. doi:10.1039/d2ra05717d

Badanie kompleksów inkluzyjnych cyklodekstryn z cieczami jonowymi

[Magdalena Mańkowska](#), Ola Grabowska, Sergey A. Samsonov, Dariusz Wyrzykowski

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

magdalena.mankowska@phdstud.ug.edu.pl

Pomimo powszechnego zastosowania cyklodekstryn (CD) w poprawie rozpuszczalności, stabilności i biodostępności substancji aktywnych, wciąż brakuje systematycznej wiedzy na temat związku między strukturą małowcząsteczkowego liganda a termodynamiką i mechanizmem jego wiązania z różnymi typami CD. Istniejące badania koncentrują się głównie na wybranych parach gospodarz-gość, nie pozwalając na przewidywanie siły i trwałości kompleksów inkluzyjnych w szerszym zakresie. Luka ta stanowi istotną przeszkodę w racjonalnym projektowaniu nośników CD o podwyższonej selektywności i skuteczności, szczególnie w kontekście konkurencyjnych oddziaływań z białkami, które decydują o losie biologicznym liganda.

Celem podjętych badań jest wypełnienie tej luki poprzez nie tylko identyfikację cech strukturalnych i fizykochemicznych ligandów warunkujących wiązanie z CD, ale przede wszystkim opracowanie predykcyjnego modelu zależności struktura-termodynamika dla szerokiej gamy układów inkluzyjnych. Nowatorstwo rozwiązania polega na połączeniu precyzyjnych pomiarów kalorymetrycznych (ITC) z zaawansowaną dynamiką molekularną dla 42 kompleksów utworzonych przez sześć różnych CD (w tym pochodne 2-hydroksypropylowe i sulfonowe) oraz ciecze jonowe o zróżnicowanej długości łańcucha i budowie części hydrofilowej. Dzięki temu możliwe będzie określenie, które modyfikacje CD i które cechy liganda (hydrofobowość, elastyczność, objętość, obecność grup polarnych) decydują o entalpowym i entropowym wkładzie w stabilność kompleksu.

W dalszym etapie badań wybrane cyklodekstryny posłużą jako cząsteczki konkurujące z białkami osocza krwi, tj. albuminami, AGP (alfa-1-kwaśną glikoproteiną), apotransferyną oraz lizozymem, o ligand. Umożliwi to określenie, w jakim stopniu obecność alternatywnego „gospodarza” (cyklodekstryny) wpływa na powinowactwo, stechiometrię oraz mechanizm wiązania liganda z białkiem, czyli jego rzeczywistym celem molekularnym. Takie podejście stanowi krok w kierunku projektowania cyklodekstrynowych nośników, które nie tylko zwiększają rozpuszczalność ligandów, ale również umożliwiają kontrolę ich interakcji z białkami. Jest to kluczowe z perspektywy przewidywania zarówno efektywności, jak i bezpieczeństwa potencjalnych terapii.

[1] Dos Santos Silva Araújo, L., Lazzara, G., Chiappisi, L. Cyclodextrin/surfactant inclusion complexes: An integrated view of their thermodynamic and structural properties. *Adv. Colloid. Interface Sci.* 289, 102375 (2021). doi:10.1016/j.cis.2021.102375

[2] Kogut, M.M., Grabowska, O., Wyrzykowski, D., Samsonov, S.A. Affinity and putative entrance mechanisms of alkyl sulfates into the β -CD cavity. *J. Mol. Liq.* 364, 119978 (2022). doi:10.1016/j.molliq.2022.119978

Zależność struktura-aktywność arylowych sulfonamidów w kontekście aktywności wobec wybranych biocząsteczek

[Magdalena Stasiuk](#), Sandra Brzeska, Dawid Dębowski, Mariusz Makowski

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

magdalena.stasiuk@phdstud.ug.edu.pl

Arylowe pochodne sulfonamidów stanowią interesującą grupę związków bioaktywnych, tradycyjnie badanych jako inhibitory anhidrazy węglanowej (CA). Enzym ten odgrywa istotną rolę w regulacji równowagi kwasowo-zasadowej, a niektóre jego izoformy wykazują nadekspresję w tkankach nowotworowych, uczestnicząc w utrzymaniu kwaśnego mikrośrodowiska. Z tego względu inhibitory anhidrazy węglanowej są intensywnie badane jako możliwe związki przeciwnowotworowe, zdolne do zaburzania regulacji pH i hamowania proliferacji komórek rakowych¹. Jednocześnie istotnym elementem charakterystyki biologicznej związków niskocząsteczkowych jest ich zdolność do oddziaływania z DNA. Badania przeprowadzone w roztworze pozwalają określić sposób wiązania, siłę powinowactwa oraz wpływ związków na strukturę i stabilność helisy DNA, dostarczając w ten sposób istotnych informacji w kontekście projektowania nowych bioaktywnych związków².

Celem opisanych badań jest określenie zależności struktura–aktywność (ang. structure-active relationship, SAR) arylowych pochodnych sulfonamidowych różniących się obecnością odmiennych wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych. Płaska i stosunkowo sztywna struktura tych związków, w połączeniu z ich hydrofobowością oraz rozległym układem zdelokalizowanych elektronów π , wskazuje na ich potencjał do oddziaływań typu π – π z parami zasad DNA, a tym samym sugeruje możliwość interkalacji w strukturę podwójnej helisy. Obecność grupy sulfonamidowej wskazuje natomiast na potencjał tych związków do inhibicji anhidrazy węglanowej, co może dodatkowo modulować ich aktywność biologiczną. Poza syntezą chemiczną przeprowadzono również kompleksową charakterystykę otrzymanych związków pod kątem ich oddziaływania z DNA oraz inhibicji anhidrazy węglanowej. Analizy wykonano z wykorzystaniem metod spektroskopowych (badania oddziaływania z DNA oraz inhibicji enzymu) oraz techniki switchSense. Przedstawione badania uzupełniono o analizę właściwości fizykochemicznych oraz testy biologiczne³. Uzyskane wyniki wskazują, że badane sulfonamidy mogą stanowić obiecujące ligandy o znaczeniu biologicznym, zdolne do efektywnego oddziaływania z DNA.

[1] Abbate F, Casini A, Owa T, Scozzafava A, Supuran C T. Carbonic anhydrase inhibitors: E7070, a sulfonamide anticancer agent, potently inhibits cytosolic isozymes I and II, and transmembrane, tumor-associated isozyme IX. , *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 14 (2004) 217–223. doi:10.1016/j.bmcl.2003.09.062

[2] Ciesielska A, Brzeski J, Zarzeczkańska D, Stasiuk M, Makowski M, Brzeska S, Exploring the interaction of biologically active compounds with DNA through the application of the SwitchSense technique, UV–Vis spectroscopy, and computational methods. *Spectrochim. Acta Part A: Mol. Biomol. Spectr.* 316 (2024) 124313. doi:10.1016/j.saa.2024.124313

[3] Stasiuk M, Brzeski J, Maciejewska N, Brzeska S, Ciura K, Kazimierzczuk K, Zarzeczkańska D, Greber K E, Dębowski D, Makowski M. Spectroscopic, structural, and biological insights into novel naphthalene- and anthracene-based sulfonamides. *J. Mol. Struct.*, 2026, 1358, 145415. doi:10.1016/j.molstruc.2026.145415

Charakterystyka kompleksów inkluzyjnych z cyklodekstrynami

[Martyna Kapica](#), Dariusz Wyrzykowski, Sergey A. Samsonov

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

martyna.kapica@phdstud.ug.edu.pl

Cyklodekstryny (CD) należą do najczęściej stosowanych makrocyclicznych cząsteczek gospodarza w przemyśle spożywczym, farmaceutycznym i kosmetycznym ze względu na zdolność do tworzenia kompleksów inkluzyjnych z lipofilowymi ligandami-gośćmi. Kompleksy te powstają dzięki oddziaływaniom niekowalencyjnym, takim jak siły van der Waalsa, wiązania wodorowe oraz oddziaływania dipol–dipol, co prowadzi do zmian właściwości fizykochemicznych cząsteczek gościa, w tym ich rozpuszczalności, reaktywności chemicznej i stabilności wobec degradacji.

W ramach realizacji pracy doktorskiej przeprowadziłam badania nad fizykochemicznymi podstawami oddziaływań pomiędzy cyklodekstrynami (α -, β - i γ -CD) a trzema lipopeptydami: oktanoilowanym (C8-KR12-NH₂), laurylowanym (C12-KR12-NH₂) i mirystoilowanym (C14-KR12-NH₂) peptydem KR12 (K18R19IVQR23IK25DFLR29-NH₂), najmniejszym peptydem przeciwdrobnoustrojowym pochodzącym z ludzkiej katelicyny LL-37¹.

Izotermiczna kalorymetria miareczkowa (ITC), wsparta danymi ze spektroskopii dichroizmu kołowego, umożliwiła określenie stechiometrii kompleksów, stałych wiązania oraz parametrów termodynamicznych oddziaływań (ΔG , ΔH , $T\Delta S$), pozwalając opisać te interakcje na poziomie molekularnym. Analizę uzupełniono symulacjami dynamiki molekularnej, które pozwoliły ocenić wpływ długości hydrofobowych łańcuchów lipopeptydów oraz wielkości wnęki cyklodekstryn na siłę oddziaływań i zaproponować mechanizmy tworzenia kompleksów.

Na podstawie przeprowadzonych badań wykazałam zdolność cyklodekstryn i lipopeptydów do tworzenia trwałych kompleksów inkluzyjnych. Zjawisko to może chronić lipopeptydy przed degradacją środowiskową oraz modyfikować ich aktywność biologiczną, w tym działanie przeciwbakteryjne. To ostatnie zagadnienie stanowi przedmiot moich dalszych planów badawczych.

[1] Wang G. Structures of human host defense cathelicidin LL-37 and its smallest antimicrobial peptide KR-12 in lipid micelles. *J Biol Chem.* 2008;283(47):32637-32643. doi:10.1074/jbc.M805533200

Wykorzystanie algorytmu genetycznego i nawlekania białkowego do optymalizacji gruboziarnistego pola sił UNRES

[Michał Jensko](#), Adam Sieradzan, Józef Liwo

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

michal.jensko@phdstud.ug.edu.pl

Zrozumienie budowy, funkcji oraz ewolucji systemów białkowych stanowi problem, którego rozwiązanie jest niezbędne dla rozumienia otaczającego nas świata¹. Metody laboratoryjne mogą dostarczać definitywnych odpowiedzi, ale są kosztowne, czasochłonne oraz niekiedy trudne w realizacji. Odpowiedz na te problemy stanowią metody teoretyczne, takie jak empiryczne pola siłowe, które umożliwiają symulacje ewolucji systemu białkowego w czasie. Ich działanie jest oparte o równanie energii potencjalnej, które uwzględnia w modelu oddziaływania wiążące i niewiążące. Dodatkowo w równaniu pojawiają się wagi pozwalające zapobiec nieproporcjonalnemu wpływowi jednego oddziaływania na całokształt systemu. Są to skalary, których iloczyn z obliczoną wartością wkładu daje finalnie uwzględniane oddziaływanie. Najczęściej stosowanymi polami siłowymi są pełnoatomowe empiryczne pola siłowe. Funkcja energii w tych polach siłowych nie musi być matematycznie skomplikowana, a uzyskane wyniki zazwyczaj będą wiarygodne. Problemem natomiast jest symulowanie większych skal czasowych, ze względu na koszty obliczeniowe. Odpowiedz na ten problem stanowią gruboziarniste pola siłowe. Przykładem takiego pola siłowego jest UNRES², w którym zastępujemy całe grupy atomów pojedynczym pseudoatomem. Umożliwia to 1000-krotnie dłuższe symulacje, przy jednoczesnym zachowaniu wiarygodności fizycznej układu. Jednakże ceną jest większy poziom matematycznej abstrakcji równania energii, w porównaniu z polem pełnoatomowym. W mojej pracy skupiam się na optymalizacji wag funkcji energii pola sił UNRES. Wykorzystuję w tym procesie algorytm genetyczny³, który umożliwia globalne przeszukanie przestrzeni wag oraz modelowanie molekularne przez nawlekanie⁴ ("threading"), które umożliwia przeszukanie minimów wytypowanych przez algorytm genetyczny. Obliczenia te, ze względu na ich skalę, są realizowane z wykorzystaniem zasobów superkomputera TASK. W każdym etapie obliczeniowym, dla poszczególnych zestawów wag, przeprowadzam proces wielokrotnego nawlekania 80 białek reprezentatywnych na zbiór około 900 reprezentatywnych zwinięć białkowych, dając w przybliżeniu 23 040 000 kombinacji. Potencjalnie umożliwi to znalezienie wag lepszych niż te obecnie zaimplementowane w UNRES, co poprawi jakość symulacji wykonywanych z wykorzystaniem tego pola sił.

Podziękowania: NCN za finansowanie w ramach grantu 2023/51/B/ST4/01218

[1] Morris R, Black K. A, Stollar E. J; Uncovering protein function: from classification to complexes. *Essays Biochem* 2022; 66 (3): 255–285. doi:10.1042/EBC20200108

[2] Sieradzan A. K, Krupa P, Scheraga H. A, Liwo A, Czaplowski C; Physics-based potentials for the coupling between backbone- and side-chain-local conformational states in the United Residue (UNRES) force field for protein simulations. *J. Chem. Theory. Comput.* 2015; 11: 817-831. doi: 10.1021/ct500736a

[3] Katoch S, Chauhan S. S, Kumar V; A review on genetic algorithm: past, present, and future. *Multimedia Tools and Applications* 2021; 80:8091–8126 doi:10.1007/s11042-020-10139-6

[4] S. Ołdziej S, Liwo A, Czaplowski C, Pillardy J, Scheraga H. A; Optimization of the UNRES force field by hierarchical design of the potential-energy landscape. 2. Off-lattice tests of the method with single proteins. *J. Phys. Chem. B* 2004; 108:16934–16949 doi.org:10.1021/jp0403285

Funkcjonalne fibryle peptydowe do zastosowań w terapii celowanej

[Milena Czeszejko](#), Justyna Sawicka, Ewa Wieczerek, Daria Sowik², Patrycja Rachubik³, Kamila Kitowska⁴, Rafał Sądej⁴, Sylwia Rodziewicz-Motowidło

¹ Katedra Chemii Biomedycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański, Gdańsk

² Katedra Chemii Żywności i Biotechnologii, Wydział Chemii, Politechnika Gdańska, Gdańsk

³ Instytut Medycyny Doświadczalnej i Klinicznej im. Mirosława Mossakowskiego, Polska Akademia Nauk, Pracownia Nefrologii Molekularnej i Komórkowej, Gdańsk

⁴ Międzyuczelniany Wydział Biotechnologii Uniwersytetu Gdańskiego i Gdańskiego Uniwersytetu Medycznego, Gdańsk

milena.czeszejko@phdstud.ug.edu.pl

Fibryle peptydowe są samoorganizującymi się nanomateriałami o wysokiej stabilności, dużym stosunku powierzchni do objętości oraz możliwości funkcjonalizacji, dzięki czemu stanowią obiecującą platformę do zastosowań biomedycznych, w tym ukierunkowanego dostarczania leków¹. Szczególne zainteresowanie budzą układy posiadające w swej strukturze ligandy rozpoznające specyficzne receptory komórkowe.

Jednym z głównych wyzwań terapii nowotworów pozostaje selektywne dostarczanie cytostatyków do komórek nowotworowych przy jednoczesnym ograniczeniu toksyczności wobec zdrowych tkanek. W HER2-dodatnim raku piersi (*ang. HER2-positive breast cancer, HER2+ BCa*) atrakcyjnym celem terapeutycznym jest receptor HER2, którego nadekspresja wiąże się z agresywnym przebiegiem choroby. Pomimo wysokiej skuteczności terapii anty-HER2, takich jak przeciwciała monoklonalne i koniugaty przeciwciało–lek (*ang. antibody–drug conjugates, ADCs*), ich wykorzystanie ograniczają m.in. działania niepożądane na organizm człowieka, złożona budowa cząsteczki oraz wysokie koszty produkcji.

Celem pracy jest opracowanie fibrylarnego nanonośnika zdolnego do selektywnego rozpoznawania komórek HER2+ BCa. Podstawę układu stanowią fibryle tworzone przez heptapeptyd GQAGIVV (s7). W celu nadania im zdolności rozpoznawania komórek nowotworowych zastosowałam affibody ZHER2:2891, czyli niewielkie białko wiążące o wysokim powinowactwie do receptora HER2. W badaniach wykorzystałam również otrzymany wcześniej koniugat peptydu s7 z monometyloaurystatyną E (*ang. Monomethyl Auristatin E, MMAE*), stanowiący modelowy układ umożliwiający wprowadzanie substancji terapeutycznych do struktur fibrylarnych.

Przeprowadzone analizy potwierdziły zdolność peptydu s7 oraz badanych układów do tworzenia stabilnych struktur fibrylarnych. Uzyskane wyniki wskazują, że fibryle oparte na peptydzie s7 mogą stanowić platformę do konstrukcji funkcjonalnych nanonośników umożliwiających jednoczesne ukierunkowanie na receptor HER2 oraz wprowadzenie substancji terapeutycznych.

Podziękowania dla Narodowego Centrum Nauki (grant nr 2022/45/B/NZ7/03889)

[1] McVay, B., Wolfe, D. & Ramamoorthy, A. Functional amyloids as multifunctional platforms for targeted drug delivery and immunotherapy. *Langmuir* 41, 25849–25867 (2025).

Poszukiwanie nowych bakteriofagów termofilnych w próbkach środowiskowych w kierunku zastosowania jako programowane genetycznie bionanocząstki

[Monika Dębińska](#), Daria Krefft, Piotr Skowron

Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Biotechnologii Molekularnej, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza

monika.debinska@phdstud.ug.edu.pl

Bakteriofagi są najliczniejszą grupą form biologicznych występującą na Ziemi. Posiadają szeroki wachlarz możliwych zastosowań – m.in. w medycynie, biotechnologii i w różnych gałęziach przemysłu¹. Mimo to, szczególnie bakteriofagi środowisk ekstremalnych, np. termofilne, pozostają słabo poznane. Celem badań jest znalezienie nowych bakteriofagów termofilnych możliwych do stosowania na szeroką skalę.

25 próbek środowiskowych było inkubowane z płynną pożywką mikrobiologiczną, w temperaturach 45 oraz 55°C przez 5-7 dni²⁻³, w celu namnożenia obecnych w nich bakteriofagów, po czym zostały zwirowane i przefiltrowane filtrami strzykawkowymi aby pozbyć się komórek bakteryjnych i innych zanieczyszczeń. Równocześnie, seryjne rozcieńczenia każdej z próbek zostały wysiane na stałe podłoża mikrobiologiczne, w celu wyizolowania czystych kultur bakteryjnych. Następnie uzyskane filtry metody dwuwarstwowych były sprawdzane pod kątem obecności bakteriofagów infekujących szczepy wyizolowane z danej próbki środowiskowej oraz *Geobacillus stearothermophilus* strain 10. W ten sposób znaleziono zostało 7 bakteriofagów infekujących *G. stearothermophilus* strain 10, oraz 2 bakteriofagi infekujące *Bacillus licheniformis*.

W celu potwierdzenia, że znalezione bakteriofagi nie były wcześniej znane, ich materiał genetyczny poddano sekwencjonowaniu. Sekwencjonowanie 3 pierwszych bakteriofagów: WP-7 infekującego *B. licheniformis* oraz MG-1 i PL-3 infekujące *G. stearothermophilus* strain 10 potwierdziło, że są to nowe bakteriofagi. Zostały dla nich wykonane analizy bioinformatyczne obejmujące znalezienie teoretycznych sekwencji kodujących białka oraz analizy filogenetyczne.

Dla genów dwóch białek bakteriofaga WP-7, endolizyny i czynnika transkrypcyjnego, zostało przeprowadzone klonowanie molekularne. Nadprodukcja endolizyny w rekombinowanym szczepie *E.coli* została potwierdzona poprzez immunodetekcję białek na membranie PVDF, po ich oczyszczeniu chromatograficznym na złożu Ni-NTA.

1. NCN-UMO-2023/49/B/NZ2/03357

2. BMN Wydziału Chemii UG 2026 nr 539-T040-B266-26

3. BMN Wydziału Chemii UG 2025 nr 539-T040-B180-25,

4. BMN Wydziału Chemii UG 2024 nr 539-T040-B119-24

[1] Doss R.K., Palmer M., Mead D.A., Hedlund B.P; Functional biology and biotechnology of thermophilic viruses; Essays Biochem. 2023 67 671–684. doi: 10.1042/EBC20220209

[2] Liu H., Kheirvari M., Tumban E.; Potential Applications of Thermophilic Bacteriophages in One Health; Int. J. Mol. Sci.. 2023, 24, 8222. doi: 10.3390/ijms24098222

[3] Šimoliūnas E., Šimoliūnienė M., Laskevičiūtė G., Kvederaviciute K., Skapas M., Kaupinis A., Valius M., Meškys R., Kuisiene N., Geobacillus Bacteriophages from Compost Heaps: Representatives of Three New Genera within Thermophilic Siphoviruses, Viruses 2023 4;15(8):1691. doi: 10.3390/v15081691

Predicting the Attachment Efficiency of Inorganic Nanomaterials

[Natalia Buławska](#), *Michał Kałapus, Anita Sosnowska, Tomasz Puzyn*

University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, 80-308, Gdańsk, Wita Stwosza 63

natalia.bulawska@phdstud.ug.edu.pl

The aggregation attachment efficiency (α) of engineered nanomaterials (ENMs) significantly influences their environmental fate and transport. Understanding and assessing the risks associated with the transport and deposition of ENMs are essential for protecting human health and the environment. However, there is currently no comprehensive framework for predicting the environmental fate of ENMs, which limits the ability to effectively manage their production, transport, and disposal¹. Existing studies that have employed machine learning to estimate α for example, rely on heterogeneous datasets including nanomaterials, polymers, and poorly characterized substances such as soot, while largely neglecting the chemical structure of the compounds involved².

This study aims to develop a QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) model for predicting α by integrating environmental factors with material-specific characterization. To achieve a comprehensive characterization of the nanomaterial system, taking into account the complexity of the modeled process, four distinct groups of descriptors were selected. The first group comprises structural descriptors derived from the periodic table (PT descriptors), divided into three generations. These include variables such as the total number of metal atoms, molecular weight, atomic number of the metal, total electronegativity of the metal oxide, and empirical atomic radius³. The second group includes the experimental characterization of the nanomaterial as well as measurement conditions, such as the presence of coating, pH, salt addition, and particle zeta potential. The third group consists of so-called full-particle nanodescriptors, which are based on a surface-coating model of spherical nanoparticles⁴. The final group comprises semi-empirical structural descriptors, including the enthalpy of formation of a gaseous cation⁵.

In the subsequent phase, a QSPR model will be developed to elucidate the relationship between material characteristics (descriptors) and the target property (α , endpoint). Generating α data for a broad range of nanomaterials is essential for improving predictions of their environmental fate and transport, as well as for providing reliable input parameters for multimedia environmental fate models.

[1] Clavier, A., Praetorius, A. & Stoll, S. Determination of nanoparticle heteroaggregation attachment efficiencies and rates in presence of natural organic matter monomers. Monte Carlo modelling. Sci. Total Environ. 650, 530–540 (2019).

[2] Gomez-Flores, A., Bradford, S. A., Hong, G. & Kim, H. Statistical analysis, machine learning modeling, and text analytics of aggregation attachment efficiency: Mono and binary particle systems. J. Hazard. Mater. 454, 131482 (2023).

[3] Roy, J. & Roy, K. Evaluating metal oxide nanoparticle (MeOx NP) toxicity with different types of nano descriptors mainly focusing on simple periodic table-based descriptors: a mini-review. Environ. Sci.: Nano 10, 2989–3011 (2023).

[4] Tamm, K. et al. Parametrization of nanoparticles: development of full-particle nanodescriptors. Nanoscale 8, 16243–16250 (2016).

[5] Puzyn, T. et al. Using nano-QSAR to predict the cytotoxicity of metal oxide nanoparticles. Nat. Nanotechnol. 6, 175–178 (2011).

Badania ab initio anionów superhalogenowych z centralnym atomem boru: $\text{B}(\text{SO}_4)_2^-$ i $\text{B}(\text{S}_2\text{O}_3)_2^-$: struktury, stabilność i właściwości elektrochemiczne

Natalia Wiszowska, Jakub Brzeski, Sylwia Freza

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

natalia.wiszowska@phdstud.ug.edu.pl

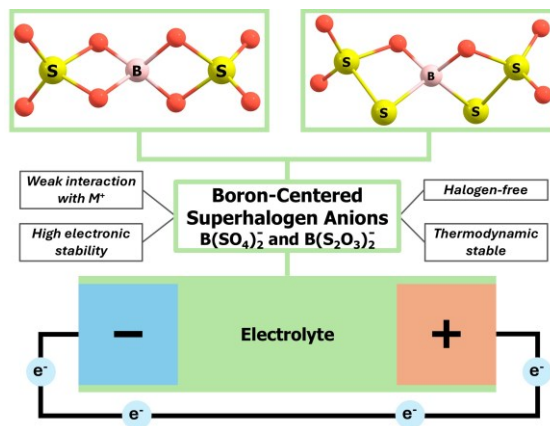
Prezentowane wyniki dotyczą nowych anionów superhalogenowych z atomem boru w roli atomu centralnego oraz nieorganicznych ligandów siarczanowych i tiosiarczanowych ($\text{B}(\text{SO}_4)_2^-$ oraz $\text{B}(\text{S}_2\text{O}_3)_2^-$), a także ich soli litowych, sodowych i potasowych. Celem badań była ocena ich stabilności geometrycznej, elektronowej i termodynamicznej oraz sprawdzenie na drodze obliczeń kwantowych właściwości elektrochemicznych tych układów w kontekście ich potencjalnego zastosowania jako bezhalogenowych składników elektrolitów do baterii metaliczno-jonowych.

Optymalizację geometrii wykonano metodą MP2/6-311+G*, natomiast wertykalne energie odrywania nadmiarowego elektronu (VDE) wyznaczono metodą OVGF. Stabilność elektrochemiczną oceniono poprzez obliczenie formalnych potencjałów redoks w rozpuszczalnikach organicznych. Dodatkowo dokonano analizy oddziaływań kation–anion oraz energie oddziaływania badanych soli z cząsteczką wody.

Wyniki wskazują, że najbardziej stabilne struktury obu anionów odpowiadają układom, w których ligandy koordynują do centralnego atomu boru w sposób dwukleszczowy. Oba aniony charakteryzują się wysoką stabilnością elektronową, z wartościami VDE w zakresie 5–8 eV, co potwierdza ich superhalogenowy charakter.

Obliczenia elektrochemiczne wykazały, że $\text{B}(\text{SO}_4)_2^-$ cechuje się potencjałami redoks porównywalnymi z powszechnie stosowanymi anionami wchodzącymi w skład elektrolitu (PF_6^- , BF_4^-), natomiast $\text{B}(\text{S}_2\text{O}_3)_2^-$ wykazuje istotnie niższą stabilność oksydacyjną. Oznacza to, że spośród badanych układów bardziej obiecujący z punktu widzenia zastosowań elektrochemicznych jest anion $\text{B}(\text{SO}_4)_2^-$. Analiza soli $\text{MB}(\text{SO}_4)_2$ i $\text{MB}(\text{S}_2\text{O}_3)_2$ (M = Li, Na, K) wykazała ich jonowy charakter oraz relatywnie słabe oddziaływania kation–anion, malejące w szeregu wraz z rosnącym promieniem atomowym kationu. Dodatkowo określone energie wiązania cząsteczki wody wskazują na umiarkowane powinowactwo do wody badanych soli, porównywalną z klasycznymi elektrolitami opartymi na PF_6^- .

Uzyskane wyniki wskazują, że zaprojektowane aniony stanowią obiecującą klasę układów dla projektowania nowych, bezhalogenowych elektrolitów.



Rys. 1. Schemat struktur anionów o potencjalnych zastosowaniu jako składniki elektrolitu do baterii metaliczno-jonowej

- [1] Roy G, Gupta R, Ranjan Sahoo S, Saha S, Asthana D, Chandra Mondal P. Ferrocene as an iconic redox marker: From solution chemistry to molecular electronic devices. *Coord Chem Rev.* 2022;473:214816. doi:10.1016/j.ccr.2022.214816
- [2] Stich M, Göttlinger M, Kurniawan M, Schmidt U, Bund A. Hydrolysis of LiPF₆ in Carbonate-Based Electrolytes for Lithium-Ion Batteries and in Aqueous Media. *The Journal of Physical Chemistry C.* 2018;122(16):8836-8842. doi:10.1021/acs.jpcc.8b02080
- [3] Jena P. Superhalogens: A Bridge between Complex Metal Hydrides and Li Ion Batteries. *J Phys Chem Lett.* 2015;6(7):1119-1125. doi:10.1021/acs.jpclett.5b00006
- [4] Kushwaha AK, Jena SS, Jena P, Nayak SK. Halogen-Free Electrolytes Based on Modified Boranes for Alkali-Ion Batteries. *The Journal of Physical Chemistry C.* 2022;126(11):5112-5121. doi:10.1021/acs.jpcc.2c00300
- [5] Nguyen HVT, Lee S, Kwak K, Lee KK. Bis(oxalate)borate-containing electrolytes for high voltage electric double-layer capacitors: A comparative study. *Electrochim Acta.* 2019;321:134649. doi:10.1016/j.electacta.2019.134649

Nanocząstki typu Janus Au-Pt wykazujące zdolność do samobieżnego ruchu

[Natalia Wyzlic](#)¹, [Adriana Zaleska-Medynska](#)¹, [Miroslawa Pawlyta](#)², [Anna Gołębiewska](#)¹, [Joanna Drzeżdżon](#)¹

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

² Politechnika Śląska, Wydział Mechaniczny Technologiczny, 44-100 Gliwice, ul. Konarskiego 18a

natalia.wyzlic@phdstud.ug.edu.pl

Nanocząstki typu Janus składające się ze złota i platyny (Au-Pt) wykazują zdolność do samobieżnego ruchu w ośrodkach płynnych pod wpływem nadtlenu wodoru (H_2O_2) oraz wykazują właściwości antynowotworowe. Do tej pory zsyntezowano jeden rodzaj nanocząstek Au-Pt, które wykazują wyżej wymienione właściwości. Niestety synteza tych cząstek jest wieloetapowa oraz trudna do odtworzenia¹. Dlatego celem badań jest opracowanie nowej metody otrzymywania nanocząstek typu Janus składających się ze złota i platyny, wykazujących zdolność do samobieżnego ruchu pod wpływem H_2O_2 oraz zbadanie ich właściwości fizykochemicznych.

Zaproponowano dwuetapową syntezę nanocząstek typu Janus Au-Pt. W pierwszym kroku wykonano syntezę nanocząstek platyny o kubicznym kształcie. Następnie przeprowadzono serię syntez obejmujących proces nukleacji nanocząstek złota na uprzednio zsyntezowanych nanocząstkach platyny. W wyniku czego otrzymano nie tylko nowoczesne nanocząstki typu Janus o wielkości około 50 nm, ale również nanocząstki Au-Pt o innej morfologii, które wcześniej nie zostały przedstawione w literaturze. Analiza morfologii otrzymanych nanocząstek, oparta na transmisyjnej mikroskopii elektronowej wykazała, że zastosowanie roztworu Na_2S jest konieczne w celu otrzymania struktury typu Janus, rdzeń(Pt)-satelita(Au) lub struktury, w której nanocząstka platyny znajduje się pomiędzy dwoma nanocząstkami złota, w przeciwnym wypadku otrzymane nanocząstki Au-Pt wykazywały geometrię typu rdzeń(Pt)-powłoka(Au). Dodatkowo wyjaśniono mechanizm działania jonów S^{2-} za pomocą miareczkowania potencjometrycznego. Wykazano różnice we właściwościach optycznych otrzymanych nanocząstek, umożliwiając ich charakterystykę w oparciu o widma UV-Vis. Zdolność do poruszania się nanocząstek typu Janus in-situ, w obecności nadtlenu wodoru, wykazano za pomocą mikroskopu cyfrowego oraz poprzez ilościowe oznaczenie wydzielonego tlenu za pomocą chromatografii gazowej. Zaobserwowano zdolność nanocząstek typu Janus do prostoliniowego ruchu, a prędkość z którą się poruszały wynosiła około 17,5 $\mu m/s$.

Podsumowując, wykazano zdolność do samobieżnego i szybkiego ruchu w warunkach in-situ nanocząstek typu Janus oraz zdefiniowano rolę jonów S^{2-} w syntezie nanocząstek.

[1] Li Q, Liu L, Huo H, et al. Nanosized Janus AuNR-Pt Motor for Enhancing NIR-II Photoacoustic Imaging of Deep Tumor and Pt²⁺ Ion-Based Chemotherapy. ACS Nano. 2022;16(5):7947-7960. doi:10.1021/acsnano.2c00732

Wpływ koordynacji jonów metali na oddziaływania pochodnej sulfonamidowej z biocząsteczkami

[Natalia Żukowska](#), Mateusz Kowalik, Dawid Dębowski, Mariusz Makowski

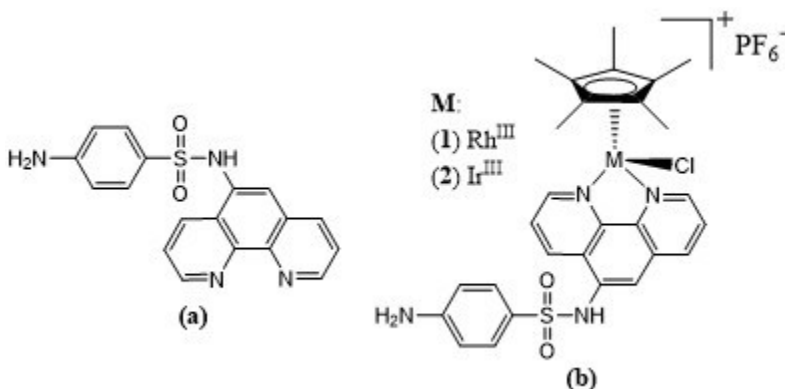
Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

natalia.zukowska@phdstud.ug.edu.pl

Nowotwory należą do najpoważniejszych wyzwań współczesnej medycyny. Zgodnie z danymi Światowej Organizacji Zdrowia w 2020 roku były przyczyną około 10 milionów zgonów rocznie¹. Związki koordynacyjne znajdują szerokie zastosowanie w leczeniu przeciwnowotworowym². Wśród badanych układów szczególnie perspektywiczne są kompleksy z jonami Rh(III) oraz ujemnie naładowanym ligandem pentametylocyklopentadienylowym³.

Celem prowadzonych badań jest charakterystyka aktywności biologicznej nowych związków koordynacyjnych opartych na jonach metali bloku *d* i ligandzie sulfonamidowym.

Nowy fenantrolinowy ligand sulfonamidowy (a) oraz jego dwa związki koordynacyjne zawierające jony Rh(III) oraz Ir(III) (b) przebadano pod względem oddziaływania z DNA oraz anhidrazą węglanową jako możliwymi celami terapeutycznymi. Ocena oddziaływań z DNA jest istotna z punktu widzenia aktywności cytotoksycznej badanych układów, zaś badania oddziaływania z anhidrazą węglanową mogą wskazywać na ich zdolność do inhibicji enzymu zaangażowanego w rozwój nowotworów.



Rys. 1. Wzór strukturalny: (a) pochodnej sulfonamidowej z podstawnikiem fenantrolinowym, (b) związku koordynacyjnego z pochodną fenantrolinową z jonami Rh^{III} i Ir^{III}

Praca ta została dofinansowana ze środków Uniwersytetu Gdańskiego w ramach Programu Małych Grantów BMN 2025 (nr grantu 539-T120-B197-25) i 2026 (nr grantu 539-T120-B261-26)

[1] <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/cancer> (dostęp 27.05.2026).

[2] Gawrońska M, Kowalik M, Duch J, Kazimierczuk K, Makowski M. Sulfonamides with hydroxyphenyl moiety: Synthesis, structure, physicochemical properties, and ability to form complexes with Rh(III) ion. *Polyhedron* 2022;221: 115865. doi:10.1016/j.poly.2022.115865

[3] Kowalik M, Masternak J, Olszewski M, Maciejewska N, Kazimierczuk K, Sitkowski J, Dąbrowska A M, Chylewska A, Makowski M. Anticancer Study on Ir(III) and Rh(III) Half-Sandwich Complexes with the Bipyridylsulfonamide Ligand, *Inorg. Chem.* 2024;63(2):1296–1316. doi:10.1021/acs.inorgchem.3c03801

Analiza oddziaływań pomiędzy enzymem naprawczym PARP1 a jego inhibitorami oraz wybranymi modelami DNA – badanie metodą termoforezy mikroskalowej

Paula Pryba, Samanta Romanowska, Janusz Rak, Magdalena Zdrowowicz-Żamojć

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

paula.pryba@phdstud.ug.edu.pl

Polimeraza poli(ADP-rybozy) 1 (PARP-1) jest kluczowym enzymem jądrowym, który odgrywa zasadniczą rolę we wczesnym rozpoznawaniu uszkodzeń DNA i stanowi centralny element regulujący komórkową odpowiedź na stres genotoksyczny^{1,2}. Po związaniu z miejscem pęknięcia nici DNA PARP-1 katalizuje przenoszenie jednostek ADP-rybozy z naturalnego substratu, NAD⁺, na siebie oraz białka docelowe, prowadząc do powstawania łańcuchów poli(ADP-rybozy), które następnie rekrutują elementy aparatu naprawczego DNA. Inhibitory PARP znajdują obecnie szerokie zastosowanie w terapii przeciwnowotworowej, a ich skuteczność wynika nie tylko z hamowania aktywności katalitycznej enzymu, lecz także z indukowania zjawiska określanego jako „PARP trapping” – stabilizacji kompleksów PARP-DNA^{3,4}.

Oddziaływania wiążące PARP-1 analizowano metodą termoforezy mikroskalowej (Microscale Thermophoresis, MST) przy użyciu aparatu Monolith NanoTemper NT.115. Wyznaczono stałe dysocjacji (Kd) dla kompleksów PARP-1 z siedmioma inhibitorami: talazoparib, olaparib, rucaparib, veliparib, iniparib, A966492 oraz AZD2461, a także z NAD⁺. Dodatkowo zbadano powinowactwo PARP-1 do różnych modeli DNA, obejmujących pęknięcie pojedynczej nici (SSB), jednoniciowe DNA (ssDNA) oraz dwuniciowe DNA (dsDNA).

Metoda MST umożliwiła wiarygodne określenie powinowactwa wiązania PARP-1 zarówno do inhibitorów, jak i do różnych struktur DNA. Zaobserwowano wyraźne różnice w powinowactwie PARP-1 do poszczególnych modeli DNA, potwierdzające preferencyjne rozpoznawanie struktur przez ten enzym. Analiza wybranych inhibitorów wskazała również na kluczową rolę mechanizmu „DNA trapping” w determinowaniu ich aktywności biologicznej i potencjału terapeutycznego.

Ponadto zbadano, czy obecność DNA jest niezbędna do aktywacji PARP-1 oraz czy warunkuje dostęp NAD⁺ i inhibitorów do kieszeni katalitycznej enzymu. Uzyskane wyniki dostarczają nowych informacji na temat zależności pomiędzy rozpoznawaniem uszkodzeń DNA, aktywacją enzymu i skutecznością działania inhibitorów PARP.

Przeprowadzone badania pokazują, że MST stanowi wszechstronne i efektywne narzędzie do analizy oddziaływań PARP-1 z inhibitorami oraz różnymi modelami DNA. Dalszy rozwój metod MST, szczególnie w kierunku dokładniejszej charakterystyki parametrów kinetycznych, może stworzyć nowe możliwości badania dynamicznych oddziaływań białko–DNA, które odgrywają fundamentalną rolę w procesach naprawy uszkodzeń DNA.

[1] Eustermann S., et al. Structural basis of detection and signaling of DNA single-strand breaks by human PARP-1. *Molecular Cell*, 60(5), 2015, 742–754.

[2] Zandarashvili L., et al. Structural basis for allosteric PARP-1 retention on DNA breaks. *Science*, 368(6486), 2020, eaax6367.

[3] Chen H.-D., et al. Increased PARP1-DNA binding due to autoPARylation inhibition of PARP1 on DNA rather than PARP1-DNA trapping is correlated with PARP1 inhibitor's cytotoxicity. *International Journal of Cancer*, 145(3), 2019, 714–727.

[4] Gopal A.A., et al. PARP trapping is governed by the PARP inhibitor dissociation rate constant. *Cell Chemical Biology*, 31(7), 2024, 1373–1302.

Development of Improper Torsional Potentials for Coarse-Grained Simulations of Amino-acid Racemization

[Sümeyye Atmaca](#), *Józef Liwo*

University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, 80-308, Gdańsk, Wita Stwosza 63

sumeyye.atmaca@phdstud.ug.edu.pl

Improper torsional potentials can describe the racemisation of amino acid residues at the coarse-grained level¹. The potential of mean force (PMF) for the enolisation of a serine residue, which serves as the intermediate state in racemisation, has been determined and used to parameterise the respective terms in the UNRES coarse-grained force field². Quantum mechanics (QM) calculations at the PM7 level were conducted to investigate the enolisation pathway and to determine the associated PMF for the keto-enol conversion of serine. Starting from the reaction path determined in our earlier stud¹, we defined the coarse-grained coordinates as the $C^\alpha \cdots C^\alpha \cdots C^\alpha$ virtual-bond angle θ , and the angles α and β of the spherical coordinate system that define the location of the side-chain centre with respect to the $C^\alpha \cdots C^\alpha \cdots C^\alpha$ frame. Sampling the configurational space around each point of the reaction path yielded 451,087 points. Boltzmann sums at $T = 298$ K were computed in three-dimensional bins and the PMF was obtained by Boltzmann inversion. The PMF surface was used to parameterise analytical expressions for the improper torsional potentials of the UNRES force field, including angular, single torsional, and double torsional terms. The parameterised potentials were implemented in UNRES and applied to simulate the enantiomerisation behaviour of short serine-containing peptides (GSG, GSGYG, GSGGYG, and GGSYG). The results were compared with experimental data from reversed-phase high-performance liquid chromatography (RP-HPLC) stereoinversion studies. While the simulations reproduced certain aspects of the experimental behaviour, the separation effect observed experimentally between peptides with different chirality configurations was not recovered, which is attributed to the double and triple torsional terms not yet being fully active in the force field. The results of this research were presented as a poster at the Tenth Polish–Korean Conference, "Protein Folding: Theoretical and Experimental Approaches," held in Gdańsk, Poland, 8–10 September 2025, and as an oral presentation at MathModel 2025, held in Borovets, Bulgaria, 10–13 December 2025.

This work is supported by NCN as part of the project Sheng-2, No. UMO-2021/40/Q/ST4/00035 Data-assisted modeling of the ensemble structure of intrinsically disordered proteins and their assemblies, and OPUS grant, NCN, UMO-2023/51/B/ST4/01218 Correlated mean-field interactions propagated along polypeptide chain as a key to understanding the structure formation, dynamics, and allostery of proteins and physics-based modeling thereof

[1] Agnieszka G. Lipska, Adam K. Sieradzian, Sümeyye Atmaca, Cezary Czaplowski, and Adam Liwo, "Toward Consistent Physics-Based Modeling of Local Backbone Structures and Chirality Change of Proteins in Coarse-Grained Approaches", *The Journal of Physical Chemistry Letters* 14 (44), 9824-9833 (2023)

[2] Fujii N, Kaji Y, Fujii N. D-Amino acids in aged proteins: analysis and biological relevance. *J Chromatogr B Analyt Technol Biomed Life Sci.* 2011 Nov 1;879(29):3141-7. doi: 10.1016/j.jchromb.2011.05.051. Epub 2011 Jun 12. PMID: 21723211

[3] Sadakane Y, Kobayashi M, Sano M, Morimoto S, Hagino M. Quantification of serine residue stereoinversion in a short peptide by reversed-phase high-performance liquid chromatography: analysis of mechanisms promoting serine stereoinversion. *Anal Sci.* 2024 May;40(5):925-934. doi: 10.1007/s44211-024-00543-5. Epub 2024 Mar 26. PMID: 38528254.

Predicting the Environmental Fate of Nanomaterials: A Probabilistic Framework for Sustainable Nano-Innovation

[Szymon Swiątek Brzeziński](#), *Michał Kałapus*, *Tomasz Puzyn*

Laboratory of Environmental Chemoinformatics, Faculty of Chemistry, University of Gdańsk

szymon.swiatekbrzezinski@phdstud.ug.edu.pl

Engineered nanoparticles (ENPs) drive modern chemical innovation, but their sustainable use requires a clear understanding of their environmental footprint. In aquatic ecosystems, heteroaggregation is a key process that controls the mobility and persistence of ENPs. However, the role of aggregation varies greatly across different materials - a knowledge gap that may complicate the development of Safe-by-Design nanomaterials.

In this study, we propose a quantitative metric, the probability of aggregation dominance (D_{agg}), to assess environmental stability¹. We combined classical DLVO theory with Monte Carlo simulations to account for the dynamic variability of natural waters, including fluctuations in ionic strength and natural particle concentrations. This enabled the evaluation of kinetic competition between aggregation and other removal processes, such as sedimentation and dissolution, using a multimedia fate modeling approach².

Our findings reveal that aggregation dominance is not universal - its probability ranges from a few percent to 100% depending on the specific material. We demonstrate that the core material's Hamaker constant fundamentally drives this behavior by dictating the intrinsic strength of attractive van der Waals interactions and the height of the colloidal energy barrier. Specifically, materials with high Hamaker constants (on the order of 10^{-19} J), such as high-polarizability metals, consistently aggregate and exhibit high attachment efficiencies. In contrast, the behavior of certain metal oxides and fluorides (characterized by lower constants, around 10^{-20} J) remains highly variable. For these materials, environmental fate can shift drastically due to subtle variations in particle size and surface charge, requiring much more favorable electrostatic conditions for aggregation to prevail.

To bridge the gap between fundamental colloid science and environmental sustainability, we developed a classification scheme - a five-tier framework for grouping nanomaterials based on their environmental persistence¹. By providing a predictive tool for both the Safe-by-Design process and risk assessment, this classification scheme empowers researchers to innovate responsibly, while assisting environmental regulators in ensuring that new nanomaterials are environmentally compatible.

Supported by the National Science Centre, Poland [Grant no.: UMO-2020/39/B/ST5/12497, "FateNANO"]

[1] Swiatek Brzezinski S, Kalapus M, Puzyn T. When does aggregation matter? The CLUMP scheme for classifying nanoparticles based on the influence of aggregation on environmental fate. *Environ Sci Nano*. 2026;13(4):979-991. doi:10.1039/d5en00950b

[2] Meesters JAJ, Peijnenburg WJGM, Hendriks AJ, Van de Meent D, Quik JTK. A model sensitivity analysis to determine the most important physicochemical properties driving environmental fate and exposure of engineered nanoparticles. *Environ Sci Nano*. 2019;6(7):2049-2060. doi:10.1039/c9en00117d

Machine learning/quantum mechanical photodegradation modeling of bisphenols in aquatic media

[Szymon Zdybel](#), Leonid Gorb, Anita Sosnowska, Tomasz Puzyn

University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, 80-308, Gdańsk, Wita Stwosza 63

szymon.zdybel@phdstud.ug.edu.pl

Polycarbonates (PC), widely used synthetic polymers, represent a significant and persistent environmental pollutant¹. Their breakdown into micro- and nanoparticles² raises growing ecological and societal concern due to the release of Bisphenol A (BPA - a highly toxic, endocrine-disrupting compound³. This research addresses the environmental fate of polycarbonate nanoparticles by presenting a semi-empirical computational framework for predicting their multistep photodegradation kinetics.

Our previously developed approach which combines Density Functional Theory (DFT) calculations with a modified Shrinking Core Model⁴, was used to predict the degradation rates without relying on empirically fitted reaction rate constants. The quantum mechanical analysis, performed at the ω -B97M-D3/def2-SVP level of theory, evaluates both the photochemical release of BPA from the polymer matrix and the complex kinetics of its subsequent degradation initiated by hydroxyl radicals ($\bullet$ OH).

The model's predictions show excellent agreement with macroscopic experimental data, but crucially, our computational framework overcomes existing analytical limitations by providing a complete, high-resolution mapping of the $\bullet$ OH-driven BPA degradation. We successfully elucidated the exact reaction mechanisms, full kinetic profiles, and all specific transient intermediates and final transformation products details that experimental approaches have previously been unable to precisely isolate and characterize⁵. Furthermore, we plan to establish BET surface area and porosity relationship with photon absorption, that supposingly will enhance the initial PC photodegradation efficiency. This framework serves as a comprehensive tool for assessing the longevity of polycarbonates, tracking the precise environmental fate of toxic BPA byproducts, and informing the development of safer plastic waste management strategies to minimize public health risks.

This work is supported by National Science Center as part of the project OPUS-20 No. UMO-2020/39/B/ST5/02497, „Modeling key structural properties of nanoparticles that determine their environmental release and transport - FateNANO”

[1] Seewoo BJ, Wong EVS, Mulders YR, et al. Impacts associated with the plastic polymers polycarbonate, polystyrene, polyvinyl chloride, and polybutadiene across their life cycle: A review. *Heliyon*. 2024;10(12):e32912. doi:10.1016/j.heliyon.2024.e32912

[2] Qin J, Liang B, Peng Z, Lin C. Generation of microplastic particles during degradation of polycarbonate films in various aqueous media and their characterization. *J Hazard Mater*. 2021;415:125640. doi:10.1016/j.jhazmat.2021.125640

[3] Adamovsky O, Groh KJ, Białk-Bielińska A, et al. Exploring BPA alternatives – Environmental levels and toxicity review. *Environ Int*. 2024;189:108728. doi:10.1016/j.envint.2024.108728

[4] Zdybel S, Gorb L, Kalapus M, Sosnowska A, Puzyn T. Computationally predicted persistence of micro- and nanoplastics: Decay of polyethylene terephthalate in neutral, acidic and alkaline media. *J Hazard Mater*. 2026;511:141909. doi:10.1016/j.jhazmat.2026.141909

[5] Anstine DM, Zubatyuk R, Isayev O. AI-driven discovery of novel polymers. *Chem Sci*. 2025;16(23). doi:10.1039/d4sc90153f

Abstrakty

Synthesis and Characterization of Photoactive Si-Based Materials for Treatment of Emergency Contaminants

[Aduigna Ayu](#), Aleksandra Pieczyńska, Adriana Zaleska-Medynska

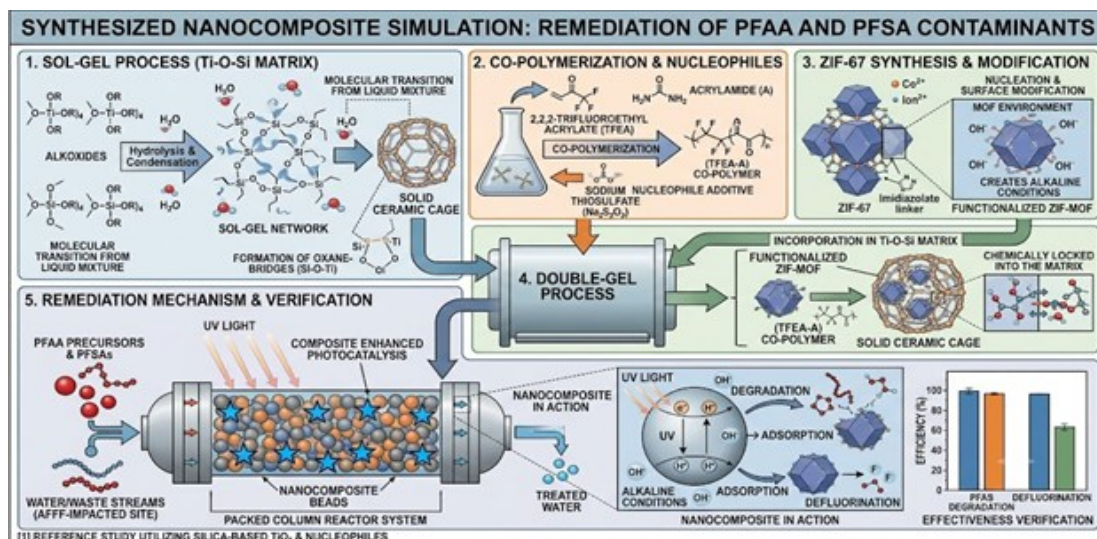
Department of Environmental Technology, Faculty of Chemistry, University of Gdansk, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk

adugnaabera.ayu@phdstud.ug.edu.pl

The application of photocatalytic materials in batch and continuous-flow systems is a high-priority for tackling environmental emerging contaminants. So, developing silica-based material as destructive technologies for remediations of PFAS and other recalcitrant substances from different contaminant sources is crucial nowadays. The other study also relies on silica-based TiO_2 nanocomposite material with the addition of nucleophiles ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$) in a packed column reactor system showed a great efficiency on photocatalytic degradation of PFAS¹.

This research fills the gap in the use of photocatalytic nanocomposite materials based on silica and titanium dioxide, where the formation of oxane bridges (Si-O-Ti) is expected to ensure chemical stability and overcome the kinetic barriers to complete degradation emergency contaminants such as PFAS and PFSA precursors. Additionally, modification of these materials with MOF structures is planned to enhance their sorption properties and photocatalytic activity.

Nowadays, experimental research activity started by synthesizing Ti-O-Si through sol-gel process and calcinated in different temperature conditions. The characterization of obtained materials with SEM (to identify the porous morphology) and BET (absorption surface area) was performed. For the coming experimental activity, and forwarded objectives of research see Figure 1, as a full schemes and it shows the simulation of synthesis of nanocomposite materials based on surface functionalized ZIF-MOF in Si-Ti matrix, through the molecular transition from a liquid mixture to a solid ceramic cage.



Rys. 1. AI-generated schemes of nowadays and future synthesis, characterization and application of the nanocomposite's materials

[1] Crimi, M. L., Holsen, T. A., & Bell, C. D. (2022). Coupled photocatalytic alkaline media as a destructive technology for per- and polyfluoroalkyl substances in aqueous film-forming foam-impacted stormwater. *Chemosphere*, 287, 132262. doi.org

Synteza degraderów lizosomalnych (LYTAC) czynnika martwicy nowotworów alfa do hamowania procesów zapalnych i wzmacniania immunoterapii nowotworów

[Aleksandra Kruk](#), Seweryn Żubrowski, Avinash Mali, Mayurdhvaj Rathod, Tadeusz Holak

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

aleksandra.kruk@phdstud.ug.edu.pl

Celem projektu jest opracowanie i synteza degraderów opartych na technologii Lysosome-Targeting Chimeras (LYTAC). Otrzymane związki będą wykorzystywane do selektywnej degradacji czynnika martwicy nowotworu alfa (TNF- α) w komórkach nowotworowych oraz do badania szlaków sygnałowych TNF z receptorami TNFR1 i TNFR2. Pozwoli to ocenić hamowanie procesów zapalnych i potencjał wspomagania immunoterapii nowotworów. Równolegle prowadzone będą badania nad klasycznymi małowcząsteczkowymi inhibitorami TNF, które posłużą jako związki referencyjne do porównania z istniejącymi inhibitorami oraz do oceny różnic między bezpośrednim hamowaniem TNF a jego degradacją z wykorzystaniem technologii LYTAC.

TNF (tumor necrosis factor) jest plejotropową cytokiną o kluczowej roli w regulacji odpowiedzi zapalnej i immunologicznej. Odgrywa istotną funkcję w patogenezie wielu chorób autoimmunologicznych, a także wpływa na kształtowanie mikrośrodowiska nowotworowego. Obecnie stosowane terapie anty-TNF oparte są głównie na przeciwciałach monoklonalnych, których zastosowanie ograniczają immunogenność, wysokie koszty produkcji oraz słaba penetracja tkanek. W związku z tym poszukiwane są alternatywne strategie terapeutyczne oparte na małowcząsteczkowych modulatorach¹.

Projektowane degradery LYTAC są bifunkcyjnymi koniugatami, umożliwiającymi selektywną degradację białek zewnątrzkomórkowych oraz białek obecnych na powierzchni komórek. Mechanizm ich działania polega na jednoczesnym wiązaniu białka docelowego i receptora kierującego kompleks do lizosomów, gdzie następuje jego degradacja². W ramach projektu cząsteczki LYTAC będą zbudowane z ligandu wiążącego TNF, łącznika oraz peptydu IGF2, który umożliwia oddziaływanie z receptorem IGF2R i transport całego kompleksu do lizosomu. Właściwości opracowanych związków będą oceniane przy użyciu metod biofizycznych i strukturalnych (SPR, MST, NMR, krystalografia rentgenowska), testów komórkowych monitorujących internalizację i degradację TNF oraz badań in vivo w modelach mysich.

Badania sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach projektu OPUS 27 nr 2024/53/B/NZ7/02591

[1] Siegmund, D., Wajant, H. TNF and TNF receptors as therapeutic targets for rheumatic diseases and beyond. *Nat. Rev. Rheumatol.* 2023; 19: 576–591

[2] Banik S. M., Pedram K., Wisnovsky S., Ahn G., Riley N.M., Bertozzi C.R., *Nature* 2020; 584: 291–297

Peptydowe inhibitory punktów kontrolnych LAG3 i CD200

[Aleksandra Wawrzaszek](#)¹, *Katarzyna Kuncewicz*¹, *Lisa Gugler*², *Adrianna Banach-Kopeć*³, *Szymon Mania*³, *Jacek Plewka*⁴, *Robert Tylingo*³, *Agnes Klar*², *Sylwia Rodziewicz-Motowidło*¹

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

² University of Zurich, Katedra Chirurgii, CH-8952 Schlieren, Zurich, Wagistrasse 12

³ Politechnika Gdańska, Wydział Chemii, 80-233 Gdańsk, Gabriela Narutowicza 11/12

⁴ Uniwersytet Jagielloński, Wydział Chemii, 30-387 Kraków, Gronostajowa 2

aleksandra.wawrzaszek@phdstud.ug.edu.pl

Układ immunologiczny chroni organizm nie tylko przed zakażeniami, lecz także przed komórkami nowotworowymi. Jego funkcjonowanie jest regulowane m.in. przez punkty kontrolne odpowiedzi immunologicznej, które kontrolują aktywację limfocytów T oraz intensywność odpowiedzi immunologicznej. Oprócz punktów kontrolnych wzmacniających odpowiedź immunologiczną występują również punkty hamujące aktywność układu odpornościowego. W warunkach fizjologicznych odpowiadają one za wygaszanie odpowiedzi immunologicznej po usunięciu zagrożenia. Komórki nowotworowe mogą jednak wykorzystywać te mechanizmy, aby uniknąć rozpoznania i zniszczenia przez układ odpornościowy. W immunoterapii dąży się do blokowania hamujących punktów kontrolnych za pomocą inhibitorów, takich jak przeciwciała monoklonalne, peptydy lub związki małowcząsteczkowe. Obecnie do nowych celów molekularnych należą kompleksy białkowe LAG3/MHCII oraz CD200/CD200R, których blokada może ograniczać rozwój różnych typów nowotworów^{1,2}.

W pierwszym roku realizacji pracy doktorskiej zajmowałam się projektowaniem inhibitorów peptydowych blokujących tworzenie kompleksów CD200/CD200R oraz LAG3/MHCII. Następnie przeprowadziłam syntezę zaprojektowanych peptydów na nośniku stałym, z zastosowaniem strategii Fmoc/tBu, wykorzystując automatyczny syntezyzator mikrofalowy Liberty Blue firmy CEM. Równolegle część peptydów syntetyzowałam manualnie. Otrzymane związki oczyściłam za pomocą wysokosprawnej chromatografii cieczowej w układzie faz odwróconych. W kolejnym etapie część peptydów poddałam utlenianiu w celu utworzenia mostka disulfidowego, a następnie ponownie je oczyściłam. Identyfikację oczyszczonych peptydów przeprowadziłam z wykorzystaniem spektrometrii mas LC-ESI-IT-TOF MS, natomiast ich czystość oceniłam za pomocą ultrasprawnej chromatografii cieczowej. Obecnie prowadzę testy immunoenzymatyczne mające na celu ocenę, czy otrzymane przeze mnie peptydy wykazują zdolność do hamowania tworzenia kompleksów białkowych LAG3/MHCII oraz CD200/CD200R.

[1] Rütsche D, Michalak-Micka K, Zielinska D, Moll H, Moehrlen U, Biedermann T, Klar AS. The Role of CD200-CD200 Receptor in Human Blood and Lymphatic Endothelial Cells in the Regulation of Skin Tissue Inflammation. *Cells*. 2022 Mar 21;11(6):1055. doi: 10.3390/cells11061055. PMID: 35326506; PMCID: PMC8947338.

[2] Andrews LP, Marciscano AE, Drake CG, Vignali DA. LAG3 (CD223) as a cancer immunotherapy target. *Immunol Rev*. 2017 Mar;276(1):80-96. doi: 10.1111/imr.12519. PMID: 28258692; PMCID: PMC5338468.

Synteza, charakterystyka strukturalna i fizykochemiczna oraz potencjał aplikacyjny nowych związków oksowanadu(IV)

Barbara Matusiewicz, Dariusz Wyrzykowski

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

barbara.matusiewicz@phdstud.ug.edu.pl

Kompleksy wanadu wykazują obiecujący potencjał farmakologiczny, szczególnie w leczeniu cukrzycy lub jako nowe leki przeciwnowotworowe. Główną przeszkodą w zastosowaniu klinicznym jest jednak ogólnoustrojowa toksyczność związków wanadu. Uzasadnione wydaje się zatem poszukiwanie nowych połączeń charakteryzujących się wyższą selektywnością oraz mniejszą toksycznością wobec komórek prawidłowych¹⁻³.

Bis(acetyloacetonian)oksowanadu(IV), VO(acac)₂, choć nie jest dobrym kandydatem na lek, stanowi główny prekursor w syntezie związków koordynacyjnych. Obecność w sferze koordynacyjnej jonu metalu dwóch ligandów acetyloacetonianowych (acac), zdolnych do łatwej wymiany na inne ligandy, jest istotnym punktem wyjścia do projektowania nowych, bardziej złożonych pochodnych oksowanadu(IV). Strategia doboru odpowiedniego liganda N-donorowego ma zasadnicze znaczenie dla struktury, a tym samym dla właściwości fizykochemicznych i biologicznych otrzymywanych związków. Wybór liganda determinuje bowiem reaktywność kompleksu, trwałość stopnia utlenienia jonu metalu, skłonność do reakcji hydrolizy oraz powinowactwo do biocząsteczek obecnych w środowisku biologicznym.

Celem mojej pracy było zaprojektowanie i zsyntezowanie nowych kompleksów oksowanadu(IV) oraz przeprowadzenie ich charakterystyki strukturalnej i fizykochemicznej. W wyniku badań otrzymałam serię czterech związków kompleksowych typu soli o ogólnym wzorze: [X-Im(H)]⁺[VO(acac)(Y)]⁻, gdzie [X-Im(H)]⁺ oznacza kation imidazoliniowy lub jego pochodne, natomiast Y to ligand polikarboksyłanowy (tiodioctanowy lub diglikolanowy). Związki wyizolowałam w postaci monokryształów odpowiednich do badań rentgenowskich (X-Ray), co umożliwiło wyznaczenie ich struktur krystalicznych. Wyniki analiz krystalograficznych uzupełniłam danymi ze spektroskopii w podczerwieni (IR). W kolejnym etapie pracy zastosowałam spektrofotometrię do oceny powinowactwa badanych kompleksów względem albuminy - białka transportowego obecnego w osoczu krwi, użytego jako model.

W kolejnym etapie prac otrzymane związki zostaną przebadane pod kątem aktywności biologicznej wobec komórek nowotworowych kości oraz prawidłowych osteoblastów. Wyniki tych badań pozwolą określić zależność między strukturą kompleksów oksowanadu(IV) a ich właściwościami biologicznymi oraz umożliwią porównanie ich potencjału z analogicznymi związkami opisanymi w literaturze².

[1] Maurya MR. Development of the coordination chemistry of vanadium through bis(acetylacetonato)oxovanadium(IV): synthesis, reactivity and structural aspects. *Coord Chem Rev.* 2003;237:163-181. doi:10.1016/S0010-8545(02)00293-X

[2] Chmur K, Brzeski J, Reghukmar S, et al. Structural, physicochemical, and biological insights into novel (acetylacetonate)(oxydiacetato)oxidovanadium(IV) complexes with N-containing aromatic compounds. *Chem Eur J.* 2025;31:e202404496. doi:10.1002/chem.202404496

[3] Rood JA, Reehl SR, Jacoby KA, Oliver A. Crystal structures of a series of bis(acetylacetonato)oxovanadium(IV) complexes containing N-donor pyridyl ligands. *Acta Cryst E.* 2020;76:826-830. doi:10.1107/S2056989020006246

Peptydy z domeny LRR białka SALM5 jako potencjalne inhibitory kompleksu BTLA/HVEM

[Bartosz Bigielmajer](#), [Marta Spodzieja](#)

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

bartosz.bigielmajer@phdstud.ug.edu.pl

Choroby nowotworowe stanowią poważny problem społeczny, wśród wielu metod ich leczenia dużą skutecznością wyróżnia się immunoterapia. Jej szczególnie obiecującą strategią jest blokowanie hamujących punktów kontrolnych układu immunologicznego (ang. *immune checkpoints*, ICPs), czyli białek znajdujących się na powierzchni komórek odpornościowych.

Do ICPs należą między innymi receptor – atenuator limfocytów T i B (ang. *B-and T lymphocyte attenuator*, BTLA), znajdujący się na powierzchni limfocytów T oraz jego ligand – mediator wejścia wirusa opryszczki (ang. *herpesvirus entry mediator*, HVEM), występujący na powierzchni komórek prezentujących antygen. W prawidłowych warunkach ich wiązanie hamuje odpowiedź immunologiczną, zapobiegając tym samym autoimmunizacji. Pierwsze doniesienia o zwiększonej ekspresji białka BTLA na limfocytach T w mikrośrodku nowotworu pojawiły się w 2010 roku¹. W wyniku utworzenia kompleksu BTLA/HVEM dochodzi do zahamowania aktywacji,

prolifracji i różnicowania limfocytów T, w efekcie czego komórki nowotworowe unikają eliminacji. Z tego względu blokowanie wiązania się białek BTLA i HVEM uznaje się za obiecującą strategię w terapii przeciwnowotworowej.

Jednym z białek wiążących się z HVEM jest synaptyczna cząsteczka adhezyjnopodobna 5 (ang. *synaptic adhesion-like molecule 5*, SALM5). Wykazano, że miejsce wiązania SALM5 z białkiem HVEM pokrywa się z regionem rozpoznawanym przez BTLA. Białko SALM5 zawiera domenę powtórzeń bogatych w leucynę (ang. *leucine-rich repeats*, LRR), złożoną z siedmiu pętli, które uczestniczą w tworzeniu powierzchni wiążącej dla białka HVEM². Nie ustalono jednak dotychczas, które fragmenty SALM5 bezpośrednio uczestniczą w tym oddziaływaniu, a struktura krystaliczna kompleksu HVEM/SALM5 pozostaje nieznana.

W ramach prowadzonych badań postanowiłem zidentyfikować fragmenty SALM5, odpowiedzialne za wiązanie z HVEM. W tym celu zsyntezowałem 7 peptydów, pokrywających pętle LRR białka SALM5. Aby ustabilizować peptydy i upodobnić ich strukturę do natywnego fragmentu białka, wprowadziłem do nich mostki disulfidowe. Zaprojektowane peptydy zsyntezowałem i oczyściłem. Oddziaływanie peptydów z białkiem HVEM zbadałem za pomocą termoforezy mikroskalowej (ang. *microscale thermophoresis*, MST). Na podstawie otrzymanych wyników ustaliłem, że peptydy pokrywające pętle 2 i 3 białka SALM5 oddziałują z HVEM, a wyznaczone stałe dysocjacji dla kompleksów HVEM/peptyd wynoszą odpowiednio 33 i 25 μM . Następnie planuję przeprowadzić testy ELISA, aby sprawdzić ich zdolność do hamowania wiązania się białek BTLA/HVEM.

[1] Derré L, Rivals JP, Jandus C, et al. BTLA mediates inhibition of human tumor-specific CD8+ T cells that can be partially reversed by vaccination. *J Clin Invest*. 2010;120(1):157-167. doi:10.1172/JCI40070

[2] Zhu Y, Yao S, Augustine MM, et al. Neuron-specific SALM5 limits inflammation in the CNS via its interaction with HVEM. *Sci Adv*. 2016;2(4):e1500637. Published 2016 Apr 8. doi:10.1126/sciadv.1500637

Biofunkcjonalizacja powierzchni polimerów poliestrowych poprzez immobilizację peptydów do zastosowań w regeneracji chrząstki stawowej

[David Pawłowski](#)¹, Karolina Trepczyk¹, Anna Klusak², Małgorzata Gazińska², Sylwester Domański³, Marta Klak³, Nazar Rad³, Sylwia Rodziewicz-Motowidło¹, Aneta Szymańska¹

¹ Katedra Chemii Biomedycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański, Gdańsk, Polska

² Katedra Inżynierii i Technologii Polimerów, Wydział Chemii, Politechnika Wrocławska, Wrocław, Polska

³ Polbionica S.A., Zielona Góra, Polska

david.pawlowski@phdstud.ug.edu.pl

Modyfikacje powierzchniowe polimerów poliestrowych poprzez immobilizację peptydów stanowią obiecującą strategię zwiększania ich bioaktywności w inżynierii tkanki chrzęstnej, umożliwiając poprawę interakcji komórkowych oraz integracji materiału z tkanką gospodarza^{1,2}. Ze względu na niską stabilność peptydów, szczególnie korzystne jest ich trwale unieruchamianie z wykorzystaniem grup fotoaktywnych aktywowanych promieniowaniem UV³. W ramach badań skupiono się na biofunkcjonalnych modyfikacjach powierzchni polimerowych przeznaczonych do regeneracji chrząstki stawowej, ukierunkowane na otrzymanie stabilnych układów peptyd - polimer zdolnych do oddziaływania z kwasem hialuronowym obecnym w mazi stawowej.

W ramach prac zsyntetyzowano peptydy przyciągające komórki macierzyste oraz peptydy wiążące kwas hialuronowy w technologii Fmoc/tBu z wykorzystaniem automatycznego syntezyatora mikrofalowego CEM Liberty Blue, a następnie oczyszczono je metodą semipreparatywnej HPLC i scharakteryzowano (MALDI-TOF MS, HPLC). Przeprowadzono również badania ich stabilności w wodzie, pożywkach do hodowli komórkowej oraz syntetycznej mazi stawowej imitującej warunki zapalne.

Następnie peptydy kowalencyjnie przyłączono do powierzchni polimeru poliestrowego z wykorzystaniem grup fotosieciujących. Immobilizację peptydu na krążku polimerowym oraz jego oddziaływanie z kwasem hialuronowym potwierdzono metodą ATR-FTIR, analizując charakterystyczne pasma polisacharydowe i hydroksylowe. Dodatkowo wybrany peptyd znakowano fluorescencyjnie, a jego rozmieszczenie na powierzchni materiału oceniono z użyciem aparatu Fusion X.

Równolegle prowadzone są badania cytotoksyczności zsyntezowanych peptydów na dwóch liniach komórkowych na Uniwersytecie Łódzkim. Na Politechnice Wrocławskiej wykonano badania kinetyki fotosieciowania peptydów od polimeru metodą DSC oraz zbadano mikrotwardość materiałów. Obecnie prowadzone są prace nad optymalizacją doboru rozpuszczalnika do procesu fotosieciowania.

Badania zostały zfinansowane przez M-ERA.NET oraz NCBiR w ramach projektu M-ERA.NET3/2024/98/REGENESIS/2025

[1] Lin CY, Wang YL, Chen YJ, et al. Collagen-binding peptides for the enhanced imaging, lubrication and regeneration of osteoarthritic articular cartilage. *Nat Biomed Eng.* 2022;6(10):1105-1117. doi:10.1038/s41551-022-00948-5

[2] Singh A, Corvelli M, Unterman SA, Wepasnick KA, McDonnell P, Elisseff JH. Enhanced lubrication on tissue and biomaterial surfaces through peptide-mediated binding of hyaluronic acid. *Nat Mater.* 2014;13(10):988-995. doi:10.1038/nmat4048

[3] Lepage ML, Musolino SF, Wulff JE. Design, exploitation, and rational improvements of diazirine-based universal polymer crosslinkers. *Acc Chem Res.* 2024;57(22):3327-3342. doi:10.1021/acs.accounts.4c00509

Znaczenie znamion kukurydzy (*Stigma maydis*) w medycznych i kosmetycznych aspektach terapii stopy cukrzycowej

[Eliza Wargala](#), Agata Kowalska, Elżbieta Adamska, Beata Grobelna

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

eliza.wargala@phdstud.ug.edu.pl

Stigma maydis stanowią wydłużone znamiona słupków żeńskich kwiatów kukurydzy zwyczajnej (*Zea mays* L., Poaceae). Osiągają długość od około 10 do 20 cm i charakteryzują się barwą od jasnozielonej do żółtobrazowej. Surowiec ten powstaje jako produkt uboczny uprawy kukurydzy w znacznych ilościach, jednak jego potencjał użytkowy pozostaje w dużej mierze niewykorzystany¹.

Celem pracy było przedstawienie aktualnego stanu wiedzy na temat właściwości biologicznych znamion kukurydzy, ze szczególnym uwzględnieniem możliwości wykorzystania ich ekstraktów w produktach leczniczych i kosmetycznych przeznaczonych do wspomagania pielęgnacji oraz terapii stopy cukrzycowej, a także znaczenia tego surowca w realizacji założeń gospodarki o obiegu zamkniętym. Przeprowadzona analiza dostępnych danych literaturowych wskazuje, że znamiona kukurydzy są bogatym źródłem substancji bioaktywnych, takich jak flawonoidy, kwasy fenolowe, saponiny, fitosterole, garbniki i składniki mineralne. Dotychczasowe badania potwierdziły szerokie spektrum aktywności biologicznej tego surowca, obejmujące działanie przeciwutleniające, przeciwcukrzycowe, przeciwdrobnoustrojowe oraz potencjalne przeciwnowotworowe². W patogenezie stopy cukrzycowej istotną rolę odgrywają: stres oksydacyjny, przewlekły stan zapalny, zaburzenia mikrokrażenia oraz zakażenia utrudniające proces gojenia ran. Szczegółne znaczenie przypisuje się flawonoidom, które neutralizują reaktywne formy tlenu (ROS) oraz ograniczają procesy oksydacyjne w komórkach. Wykazano również, że glikozydy flawonoidowe obecne w znamionach kukurydzy charakteryzują się wysoką aktywnością przeciwutleniającą, potwierdzono m.in. w teście redukcji rodnika DPPH³. Ponadto właściwości przeciwdrobnoustrojowe ekstraktów ze znamion kukurydzy mogą sprzyjać utrzymaniu prawidłowego stanu skóry oraz wspierać procesy regeneracyjne w obrębie zmian charakterystycznych dla stopy cukrzycowej.

Ze względu na bogaty skład związków bioaktywnych ekstrakty ze znamion kukurydzy mogą stanowić obiecujący składnik preparatów wspomagających pielęgnację i terapię zmian związanych ze stopą cukrzycową. Konieczne są jednak dalsze badania, pozwalające na ocenę ich skuteczności i bezpieczeństwa stosowania.

Dziękujemy Uniwersytetowi Gdańskiemu za sfinansowanie badań w ramach Badań Młodych Naukowców (nr BMN 539-T050-B258-26)

[1] Hasanudin K, Hashim P, Mustafa S. Corn Silk (*Stigma Maydis*) in Healthcare: A Phytochemical and Pharmacological Review. *Molecules*. 2012;17(8):9697-9715. doi:10.3390/molecules17089697

[2] Patel K, Sen DB, Sen AK, Maheshwari RA. An Attention-Grabbing Review on *Stigma Maydis* (Corn Silk). *J Nat Remedies*. Published online March 23, 2023;35-46. doi:10.18311/jnr/2023/31289

[3] Khan U, Hayat F, Khanum F, et al. Optimizing extraction conditions and isolation of bound phenolic compounds from corn silk (*Stigma maydis*) and their antioxidant effects. *J Food Sci*. 2023;88(8):3341-3356. doi:10.1111/1750-3841.16682

Which nitroimidazole derivative isomer is the most prone to electron-induced NO₂ detachment?

[Hanna Mahilevich](#), Lidia Chomicz-Mańska, Janusz Rak

University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, Department of Physical Chemistry, Laboratory of Biological Sensitizers, ul. Wita Stwosza 63, 80-308 Gdańsk, Poland

hanna.mahilevich@phdstud.ug.edu.pl

Cancer is one of the most prevalent diseases worldwide. Radiotherapy is widely used both for curative cancer treatment and for symptom control in palliative care. The effectiveness of radiotherapy against hypoxic tumors can be improved by oxygen mimetics¹. Although nitroimidazole derivatives have long been recognized as oxygen mimetics, their exact mechanism of radiosensitizing action remains unclear.

Recently, we demonstrated that radiolysis of aqueous metronidazole solutions under hypoxic conditions generates the toxic nitrogen dioxide radical ($\bullet\text{NO}_2$). This finding provides a strong basis for a new mechanistic explanation of nitroimidazole-mediated radiosensitization. To investigate the proposed NO₂-release pathway, three nitroimidazole isomers were selected: 1-methyl-2-nitroimidazole, 1-methyl-4-nitroimidazole, and 1-methyl-5-nitroimidazole (Figure 1).

The aim of this study was to determine whether the position of the nitro group affects the radiation response of nitroimidazole derivatives. Density functional theory (DFT) calculations were performed to characterize the thermodynamics and kinetics of the NO₂-release process in the selected isomers.

Theoretical predictions will then be confronted with the experimentally obtained efficiency of NO₂ release induced by X-ray irradiation. If we could demonstrate a correlation between experimentally measured NO₂-release efficiencies and the calculated activation and thermodynamic barriers, we would provide strong support for an NO₂-mediated mechanism underlying the radiosensitizing properties of nitroimidazoles.



Rys. 1. Structures of the investigated nitroimidazole isomers

This work was supported by statutory research funds of the Department of Chemistry, University of Gdańsk, grant No. DS/531-T080-D494-26 (J. Rak)

[1] Zdrowowicz M, Chomicz-Mańska L, Butowska K, et al. DNA damage radiosensitizers geared towards hydrated electrons. *Practical Aspects of Computational Chemistry V*, Springer. 2022; 125-169. doi:10.1007/978-3-030-83244-5_4

Inżynieria genetyczna termofilnego bakteriofaga TP84 – elementy nowego, indukowanego systemu ekspresyjnego

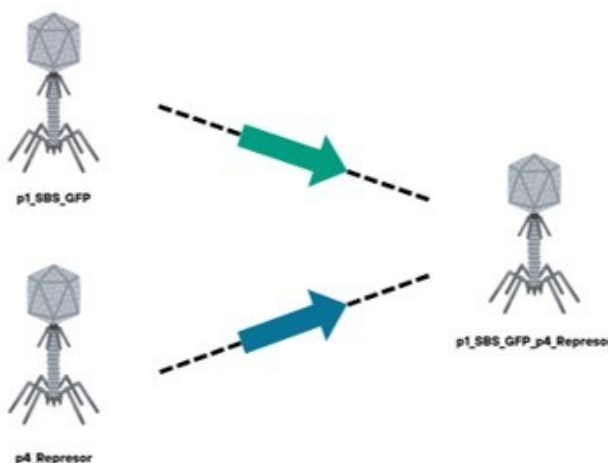
Jan Chodorski, Agnieszka Żylicz-Stachula, Ireneusz Sobolewski, Piotr M. Skowron

Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, Katedra Biotechnologii molekularnej, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63

jan.chodorski@phdstud.ug.edu.pl

W literaturze opisano wiele indukowalnych systemów ekspresji genów w bakteriach, regulowanych temperaturą¹⁻² lub światłem³, opartych na plazmidach i silnych promotorach pochodzenia bakteriofagowego. Dotychczas jednak nie opisano w pełni bakteriofagowego, indukowanego systemu ekspresji genów. Proponowana koncepcja zakłada opracowanie takiego systemu w oparciu o hybrydowego bakteriofaga zawierającego elementy regulatorowe pochodzenia eukariotycznego.

Próba konstrukcji zaprojektowanego genomu hybrydowego bakteriofaga w wariantcie jednoetapowym, polegającym na jednoczesnym wprowadzeniu do genomu dwóch elementów modułu promotor-represor-operator, nie przyniosła oczekiwanych efektów. Dlatego zdecydowano się na realizację projektu w dwóch oddzielnych etapach. Na etapie pierwszym uzyskano odpowiednio: (1) konstrukt zawierający w genomie moduł promotor-operator-gen reporterowy oraz (2) wariant zawierający gen kodujący represor, umieszczony pod kontrolą jednego z natywnych promotorów bakteriofaga TP-84. Potwierdzono stabilność otrzymanych wariantów bakteriofaga, przeprowadzając dwukrotnie reaktywację rekombinowanych fagów w protoplastach *Geobacillus stearothermophilus* 10 oraz potwierdzając prawidłowość wprowadzonych zmian genetycznych metodą sekwencjonowania DNA. Potwierdzono biosyntezę eukariotycznego czynnika transkrypcji przez bakterie podczas infekcji wybranym wariantem bakteriofaga oraz określono jej wydajność w zależności od temperatury, w której prowadzono infekcję. Drugi etap badań zakłada wykorzystanie otrzymanych rekombinowanych bakteriofagów do złożenia syntetycznego genomu docelowego konstrukt, zawierającego funkcjonalny, indukowalny moduł ekspresyjny.



Schemat 1. Schemat etapów otrzymania rekombinowanego bakteriofaga

[1] Salis, B., Spinetti, G., Scaramuzza, S. et al. High-level expression of a recombinant active microbial transglutaminase in *Escherichia coli*. BMC Biotechnol 15, 84 (2015). <https://doi.org/10.1186/s12896-015-0202-4>

[2] Menart V, Jevsevar S, Vilar M, Trobis A, Pavko A. Constitutive versus thermoinducible expression of heterologous proteins in *Escherichia coli* based on strong PR, PL promoters from phage lambda. Biotechnol Bioeng. 2003 Jul 20;83(2):181-90. doi: 10.1002/bit.10660. PMID: 12768624.

[3] Noya, R., Murakoshi, K., Fukuda, M. et al. Light inducible gene expression system for *Streptomyces*. Sci Rep 14, 25852 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41598-024-76860-6>

Przewidywanie cytotoksyczności nanomateriałów - analiza wpływu strategii walidacji na ocenę skuteczności modelu

Karol Topka Kłóńczyński, Tomasz Puzyn

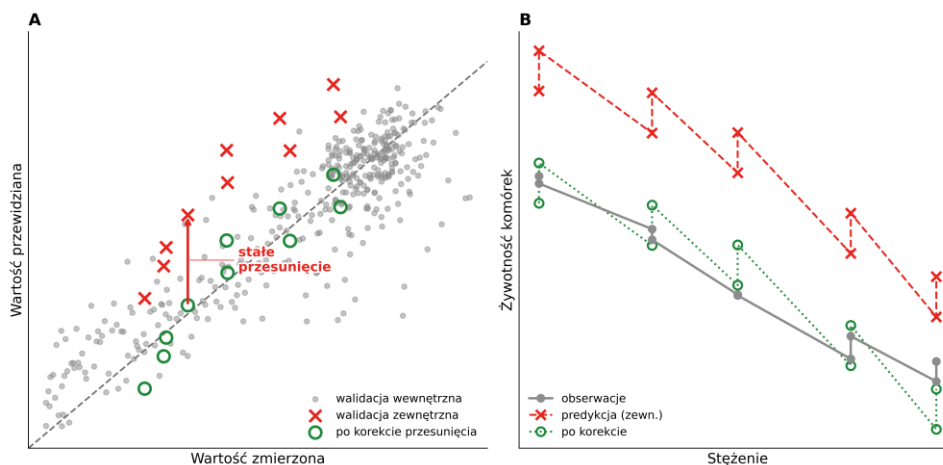
Uniwersytet Gdański, Wydział Chemii, 80-308 Gdańsk, ul. Wita Stwosza 63

karol.topkaklonczynski@phdstud.ug.edu.pl

Cytotoksyczność nanomateriałów stanowi jedno z kluczowych zagadnień nanomedycyny, a jej złożoność wynika z wielowymiarowych oddziaływań pomiędzy cząstką a układem biologicznym. Odpowiedź biologiczna na ekspozycję kształtowana jest zarówno przez właściwości fizykochemiczne samej cząstki jak i przez warunki eksperymentu oraz specyfikę układu biologicznego. Istotną rolę odgrywają tu różnice metodyczne, gdzie ten sam nanomateriał może prowadzić do rozbieżnych wyników nie tylko przy zastosowaniu różnych linii komórkowych i testów¹ ale również wówczas, gdy badany jest w analogiczny sposób, lecz w odmiennych laboratoriach².

Celem badań prowadzonych w trakcie pierwszego roku Szkoły Doktorskiej był przegląd literatury oraz zebranie i ujednolicenie danych obejmujących informacje dot. cytotoksyczności nanomateriałów, które posłużyły do zbudowania modelu uczenia maszynowego przewidującego cytotoksyczność, a także do analizy wpływu przyjętej strategii walidacji na ocenę rzeczywistej skuteczności takiego modelu.

Na podstawie zbioru danych opracowano interpretowalny model, którego skuteczność oceniono kilkoma strategiami walidacji. Wykazano, że sposób walidacji zasadniczo wpływa na wnioski o zdolności modelu do generalizacji, gdzie oceny oparte na podziałach wewnętrznych okazują się nadmiernie optymistyczne, podczas gdy walidacja uwzględniająca źródła danych ujawnia ograniczenia związane ze zróżnicowaniem pomiędzy laboratoriami. Stwierdzono przy tym, że model zachowuje zdolność odwzorowania zależności dawka odpowiedź, a obserwowane różnice mają charakter stałego przesunięcia, co wyznacza kierunek dalszych prac nad projektowaniem modeli.



Rys. 1. Stałe przesunięcie predykcji ujawnione w walidacji zewnętrznej (A) i jego korekta na krzywej dawka odpowiedź (B)

[1] A. Kroll et al., "Cytotoxicity screening of 23 engineered nanomaterials using a test matrix of ten cell lines and three different assays," Part. Fibre Toxicol., vol. 8, no. 1, p. 9, Dec. 2011, doi: 10.1186/1743-8977-8-9.

[2] T. Xia et al., "Interlaboratory Evaluation of in Vitro Cytotoxicity and Inflammatory Responses to Engineered Nanomaterials: The NIEHS Nano GO Consortium," Environ. Health Perspect., vol. 121, no. 6, pp. 683–690, Jun. 2013, doi: 10.1289/ehp.1306561.

Projektowanie i synteza peptydów terapeutycznych o właściwościach przeciwzapalnych i regeneracyjnych do stosowania w leczeniu zespołu wrzodów żołądka u koni (EGUS)

[Kinga Marszałek](#), Ewa Wieczerek, Sylwia Rodziewicz-Motowidło

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

kinga.marszalek@phdstud.ug.edu.pl

Wrzody żołądka stanowią powszechny i poważny problem kliniczny w weterynarii. U koni sportowych zespół wrzodów żołądka u koni (EGUS) występuje z bardzo wysoką częstością, sięgającą 50–90%, szczególnie u zwierząt poddawanych intensywnym treningom, mających ograniczony dostęp do paszy objętościowej oraz narażonych na przewlekły stres związany z transportem i zawodami¹. Obecnie leczenie wrzodów żołądka u zwierząt opiera się głównie na inhibitorach pompy protonowej (PPI), takich jak omeprazol, a także środkach cytoprotekcyjnych, w tym sukralfacie. Chociaż PPI skutecznie zmniejszają wydzielanie kwasu żołądkowego i przyspieszają gojenie się zmian chorobowych, ich długotrwałe stosowanie wiąże się z potencjalnymi działaniami niepożądanymi, takimi jak zaburzenia mikroflory jelitowej, dysbioza oraz upośledzone wchłanianie wapnia i magnezu².

Celem projektu jest opracowanie peptydów bioaktywnych ukierunkowanych na mechanizmy molekularne zaangażowane w regenerację błony śluzowej i regulację miejscowej odpowiedzi zapalnej. Projektowanie sekwencji peptydów bioaktywnych przeprowadzono w oparciu o aktualny stan wiedzy opisany w literaturze naukowej, ze szczególnym uwzględnieniem peptydów zaangażowanych w regenerację nabłonka przewodu pokarmowego i modulację odpowiedzi zapalnej. Wyselekcjonowane peptydy zostały zsyntezowane metodą na nośniku stałym (SPPS) w strategii Fmoc/tBu, oraz oczyszczone za pomocą wysokosprawnej chromatografii cieczowej (HPLC). Stabilność peptydów została oceniona *in vitro*, zarówno w środowisku wodnym, jak i w płynach symulujących warunki żołądkowe. Bezpieczeństwo biologiczne zaprojektowanych peptydów zostanie ocenione w testach komórkowych.

Badania zostały sfinansowane w ramach grantu Badania Młodych Naukowców, Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego 2026, nr 539-T070-B248-26

[1] Sykes BW, Hewetson M, Hepburn RJ, Luthersson N, Tamzali Y. European College of Equine Internal Medicine Consensus Statement--Equine Gastric Ulcer Syndrome in Adult Horses. *J Vet Intern Med.* 2015;29(5):1288-99. doi: 10.1111/jvim.13578

[2] Cerri S, Taminiu B, de Lusancay AH, Lecoq L, Amory H, Daube G, Cesarini C. Effect of oral administration of omeprazole on the microbiota of the gastric glandular mucosa and feces of healthy horses. *J Vet Intern Med.* 2020;34(6):2727-2737. doi: 10.1111/jvim.15937

Chimery ukierunkowujące na proteolizę (PROTAC) mające na celu eliminację nadmiaru amyloidogennych białek ludzkiego polipeptydu amyloidu wysp trzustkowych (hIAPP)

[Kinga Słomska](#), *Elżbieta Jankowska*

Katedra Chemii Biomedycznej, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański, Gdańsk

kinga.slomska@phdstud.ug.edu.pl

Odkładanie amyliny w postaci agregatów amyloidowych może prowadzić do uszkodzenia komórek oraz nasilenia procesów neurodegeneracyjnych, wskazując na jej potencjalny udział w patogenezie choroby Alzheimera¹. Obiecującym narzędziem terapeutycznym są chimery ukierunkowane na proteolizę (PROTAC), umożliwiające selektywną eliminację patologicznych i/lub wydzielanych w nadmiarze białek poprzez wykorzystanie endogennych mechanizmów degradacji komórkowej².

W bieżącym roku przeprowadzono identyfikację peptydów zdolnych do wiązania amyliny z wykorzystaniem chromatografii powinowactwa. W tym celu amylinę unieruchomiono na złożu z aktywowaną NHS Sepharose, a następnie przeprowadzono analizę interakcji z przeciwciałem anti-amylinowym, połączoną z trawieniem proteolitycznym. Uwolnione fragmenty przeciwciała zostały poddane analizie za pomocą tandemowej spektrometrii mas.

Równolegle do podejścia eksperymentalnego wykorzystano narzędzia bioinformatyczne do predykcji paratopów i identyfikacji sekwencji odpowiedzialnych za wiązanie amyliny. Na podstawie analiz eksperymentalnych i teoretycznych wytypowano najbardziej perspektywiczne sekwencje peptydowe, które zsyntetyzowano zgodnie ze strategią Fmoc i oczyszczono z zastosowaniem wysokosprawnej chromatografii cieczowej w fazie odwróconej (RP-HPLC). Ich zdolność do oddziaływania z amyliną zweryfikowano metodą mikroskalowej termoforezy (MST), wykorzystując amylinę znakowaną odczynnikami fluorescencyjnymi, takimi jak RED-NHS, Cy5-NHS oraz DNP-NHS. Dodatkowo otrzymano biotynylowane warianty peptydów przeznaczone do dalszych badań z zastosowaniem metod immunoenzymatycznych, takich jak ELISA i HTRF. Obecnie prowadzone są prace nad optymalizacją tych metod w celu wiarygodnej oceny oddziaływań peptydów z amyliną. Uzyskane wyniki posłużą do dalszej walidacji wytypowanych sekwencji jako potencjalnych elementów konstrukcyjnych cząsteczek PROTAC.

Równolegle prowadzone są również prace nad syntezą organiczną liganda rozpoznawanego przez ligazę E3, konkretnie liganda VHL. Otrzymanie tego fragmentu, umożliwi konstrukcję cząsteczek PROTAC poprzez sprzężenie VHL z wyselekcjonowanymi peptydami wiążącymi amylinę. Pozwoli to na uzyskanie PROTAC odpowiedzialnego jednocześnie za rozpoznanie amyliny oraz za rekrutację proteasomalnego układu degradacji białek².

Badania zostały sfinansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki w ramach grantu nr 2023/51/B/NZ7/00740

[1] Muhammad T, Pastore SF, Good K, Yu WH, Vincent JB. The role of amylin, a gut-brain axis hormone, in metabolic and neurological disorders. *FASEB Bioadv.* 2025;7(3):e1480. Published 2025 Jan 20. doi:10.1096/fba.2024-00151

[2] Liu Z, Hu M, Yang Y, et al. An overview of PROTACs: a promising drug discovery paradigm. *Mol Biomed.* 2022;3(1):46. Published 2022 Dec 20. doi:10.1186/s43556-022-00112-0

Substancje farmaceutyczne w skorupkach jaj pingwinów z rodzaju *Pygoscelis* z Zatoki Admiralicji (Antarktyda)

[Maja Kuźnik](#)¹, *Magda Caban*¹, *Dominika Saniewska*², *Robert Bialik*³, *Katarzyna Fudala*³

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

² Katedra Oceanografii Chemicznej i Geologii Morza, Wydział Oceanografii i Geografii, Uniwersytet Gdański, al. Marszałka Piłsudskiego 46, 81-378 Gdynia

³ Instytut Biochemii i Biofizyki Polskiej Akademii Nauk, ul. Pawińskiego 5A, 02-106 Warszawa

maja.kuznik@phdstud.ug.edu.pl

Farmaceutyki są uznawane za nowo pojawiające się zanieczyszczenia (ang. new emerging contaminants, NECs) ze względu na ich ciągle uwalnianie do środowiska, trwałość oraz potencjał do bioakumulacji i wywoływania skutków biologicznych. Choć ich obecność w jajach ptaków (zarówno hodowlanych, jak i dziko żyjących) została szeroko udokumentowana w Europie, dane dotyczące regionów polarnych pozostają bardzo ograniczone. Dotychczasowe badania prowadzone w Antarktyce wykazały obecność β -blokerów, leków przeciwbólowych, antybiotyków i leków przeciwdepresyjnych w ściekach odprowadzanych ze stacji badawczych zlokalizowanych wzdłuż wybrzeża Antarktydy, a także kofeiny i karbamazepiny w lokalnym zoobentosie. Wyniki te wskazują na potrzebę rozszerzenia badań na wyższe poziomy troficzne, w szczególności na drapieżniki, które, jako organizmy szczytowe, pełnią funkcję bioindykatorów stanu środowiska.

Badania prowadzone w regionach polarnych koncentrowały się dotychczas głównie na metalach ciężkich i trwałych zanieczyszczeniach organicznych. Analiza farmaceutyków na wysokich poziomach troficznych stanowi nowatorskie podejście w ekotoksykologii polarnej. Niniejsze badanie analizuje występowanie pozostałości farmaceutyków w skorupkach jaj trzech gatunków pingwinów z rodzaju *Pygoscelis* (pingwina Adeli, pingwina maskowego i pingwina białobrewego) z Zatoki Admiralicji na Wyspie Króla Jerzego (Szetlandy Południowe, Antarktyka). Kluczowym etapem prac było opracowanie i walidacja metody analitycznej z wykorzystaniem chromatografii cieczowej sprzężonej z tandemową spektrometrią mas (LC-MS/MS).

Analiza obejmuje 17 priorytetowych analitów wytypowanych na podstawie najnowszych regulacji Unii Europejskiej, w tym nowej dyrektywy dotyczącej oczyszczania ścieków komunalnych. Wybrane związki reprezentują zróżnicowane klasy chemiczne, obejmujące leki neuroaktywne (SSRI, SNRI, benzamidy), leki sercowo-naczyniowe (sartany, tiazdy i β -blokerzy), niesteroidowe leki przeciwzapalne (pochodne kwasu fenyllooctowego) oraz antybiotyki (makrolidy). Dodatkowo monitorowano dodatki przemysłowe (bisfenole i benzotriazol) oraz pestycydy (pochodne fenylomocznika i triazyny). Próbkę pobierano w sposób nieinwazyjny podczas trzech sezonów badawczych (2018/19, 2021/22 i 2023/24) we współpracy z Instytutem Biochemii i Biofizyki PAN. Badanie dostarcza nowych informacji na temat występowania pozostałości farmaceutyków u antarktycznych drapieżników oraz wspiera globalne działania na rzecz monitorowania nowo pojawiających się zanieczyszczeń w wrażliwych ekosystemach polarnych.

[1] Sokołowski A, Caban M, Panasiuk A, Włodarska-Kowalczyk M, Bałazy P. Low pharmaceutical pollution of epibenthic organisms from Admiralty Bay, Antarctica (King George Island, South Shetland Islands). *Sci Total Environ.* 2024;956:177277. doi:10.1016/j.scitotenv.2024.177277

[2] Szopińska M, Potapowicz J, Jankowska K, Luczkiewicz A, Svahn O, Björklund E, Nannou C, Lambropoulou D, Polkowska Ż. Pharmaceuticals and other contaminants of emerging concern in Admiralty Bay as a result of untreated wastewater discharge: status and possible environmental consequences. *Sci Total Environ.* 2022;835:155400. doi:10.1016/j.scitotenv.2022.155400

[3] Reindl AR, Wolska L, Pawłowski J, Hoszek-Mandera K, Beldowska M, Fudala K, Bialik RJ, Panasiuk A. Pygoscelis penguins as indicators of perfluoroalkyl substances pollution and global health risks-case study from King George Island (Western Antarctic). *Environ Res.* 2025;285(Pt 3):122475. doi:10.1016/j.envres.2025.122475

Konstrukty PROTAC zdolne do eliminacji nadmiaru amyloidogennego białka: ludzkiego surowiczego amyloidu A (hSAA)

[Marcel Pilarski](#), *Elżbieta Jankowska, Julia Witkowska*

Uniwersytet Gdański, ul. prof. Marii Janion 7, 80-309 Gdańsk

marcel.pilarski@phdstud.ug.edu.pl

SAA to białko ostrej fazy produkowane przez hepatocyty, którego wydzielanie znacznie wzrasta w odpowiedzi na bodźce zapalne. Nadmierna produkcja SAA jest szczególnie problematyczna w chorobach przewlekłych, takich jak reumatoidalne zapalenie stawów, nowotwory i choroba Leśniowskiego-Crohna. W podwyższonych stężeniach SAA ulega postępującej oligomeryzacji, co prowadzi do tworzenia większych agregatów, które ostatecznie odkładają się jako amyloid. Złogi te gromadzą się nie tylko w wątrobie, głównym miejscu syntezy SAA, ale także w narządach obwodowych, takich jak śledziona, nerki i serce, do których białko to może być transportowane przez krew^{1,2}. SAA wykryto również w agregatach złożonych z β -amyloidu odkładanych w mózgach osób cierpiących na chorobę Alzheimera³.

Celem pracy było zaprojektowanie, synteza oraz charakterystyka bifunkcyjnych koniugatów PROTAC, mających za zadanie tworzenie stabilnego kompleksu trójskładnikowego z SAA i ligazą ubikwityny E3, umożliwiając skuteczną ubikwitynację i późniejszą degradację nadmiernie wydzielanego SAA za pośrednictwem proteasomu⁴.

Zaplanowano, że komponent „warhead” stanowić będą peptydy wywodzące się z paratopów przeciwciała anty-SAA, aby zapewnić wysokie powinowactwo i selektywność względem białka docelowego. Dzięki wykorzystaniu modelowania molekularnego oraz narzędzia bioinformatycznego „Paratope prediction” udało się zaprojektować 6 peptydów mogących potencjalnie stanowić komponent „warhead”. Zostały one zsyntezowane z wykorzystaniem wysokowydajnej syntezy mikrofalowej na nośniku stałym, a następnie oczyszczone metodą RP-HPLC. Ich powinowactwo do SAA zostało zbadane za pomocą mikroskalowej termoforezy (MST). Badanie to wykazało, że 3 z 6 zaprojektowanych peptydów wykazuje powinowactwo do SAA i mogłoby potencjalnie zostać włączone do konstruktyw PROTAC jako „warhead”. Aby dodatkowo potwierdzić zdolność tych peptydów do oddziaływania z SAA, planowane jest także wykonanie badań z wykorzystaniem jednorodnej fluorescencji czasowo-rozdzielczej (HTRF). Po ostatecznym wytypowaniu peptydów mogących stanowić komponent „warhead” w konstruktyw PROTAC, konieczne będzie znalezienie najbardziej odpowiedniego ligandu rekrutującego ligazę E3 oraz łącznika, który połączy te dwa komponenty.

Badania finansowano ze środków Narodowego Centrum Nauki z grantu nr 2023/51/B/NZ7/00740

[1] Papa R, Lachmann HJ. Secondary AA Amyloidosis. *Rheum Dis Clin North Am*. 2018; 44(4):585-603. doi: 10.1016/j.rdc.2018.06.004.

[2] Slivnick JA, et al. Serum amyloidosis: a cardiac amyloidosis. *Eur Heart J Cardiovasc Imaging*. 2023; 24(4):e59. doi: 10.1093/ehjci/jeac264.

[3] Jang S, et al. Serum amyloid A1 is involved in amyloid plaque aggregation and memory decline in amyloid beta abundant condition. *Transgenic Res*. 2019 Dec;28(5-6):499-508. doi: 10.1007/s11248-019-00166-x.

[4] Luh LM, et al. Prey for the Proteasome: Targeted Protein Degradation-A Medicinal Chemist's Perspective. *Angew Chem Int Ed Engl*. 2020; 59(36):15448-15466. doi: 10.1002/anie.202004310.

PapayaDB: baza danych oddziaływań in silico kompleksów katepsyna–GAG

[Marta Pagielska](#), *Sergey A. Samsonov*

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

marta.pagielska@phdstud.ug.edu.pl

Katepsyny cysteinowe są rodziną proteaz odgrywających kluczową rolę w degradacji białek. Ich aktywność może być regulowana przez glikozaminoglikany (GAG-i), czyli liniowe, anionowe polisacharydy o powtarzalnej budowie, uczestniczące w wielu procesach biologicznych, takich jak proliferacja i adhezja komórek czy krzepnięcie krwi¹. Mimo istotnego znaczenia biologicznego tych oddziaływań, strukturalne podstawy tworzenia kompleksów katepsyna–GAG wciąż pozostają słabo poznane. Wynika to przede wszystkim z niewielkiej liczby eksperymentalnie wyznaczonych struktur takich kompleksów, co utrudnia opisanie, w jaki sposób GAG-i rozpoznają poszczególne katepsyny i wpływają na ich aktywność na poziomie molekularnym^{2,3}. Aby uzupełnić tę lukę, opracowywana jest PapayaDB — internetowa baza danych poświęcona oddziaływaniom in silico w kompleksach katepsyna–GAG. Platforma obejmuje systematyczne obliczenia dla 11 katepsyn cysteinowych oraz 6 klas GAG-ów, co daje ponad 300 unikalnych kompleksów. Dane zgromadzone w bazie są generowane z wykorzystaniem zaawansowanych metod in silico, obejmujących symulacje dynamiki molekularnej w reprezentacji pełnoatomowej i gruboziarnistej, a także symulacje dynamiki molekularnej z wymianą replik. Łącznie projekt obejmuje ponad 5000 symulacji. PapayaDB ma stanowić narzędzie porównawcze wspierające badania nad rozpoznawaniem i regulacją ww. oddziaływań. Baza może również znaleźć zastosowanie w opracowywaniu nowych strategii projektowania leków opartych na oddziaływaniach z GAG-ami.

Praca została sfinansowana przez Narodowe Centrum Nauki, grant nr UMO-2023/49/B/ST4/00041

[1] Bojarski K.K., Sage J., Lalmanach G., Lecaille F., Samsonov S.A. !!In silico and in vitro mapping of specificity patterns of glycosaminoglycans towards cysteine cathepsins B, L, K, S and V!! J Mol Graph Mod. 2022. Vol. 113: 108153.

[2] Kogut M.M., Marcisz M., Samsonov S.A. !!Modeling glycosaminoglycan-protein complexes!! Current Opinion in Structural Biology. 2022. Vol. 73: 102332.

[3] Perez S., Makshakova O., Angulo J., Bedini E., Bisio A., de Paz J.L., Fadda E., Guerrini M., Hricovini M., Lisacek F., Nieto P.M., Pagel K., Paiardi G., Richter R., Samsonov S.A., Vivès R.R., Nikitovic D., Ricard-Blum S. !!Glycosaminoglycans: What Remains To Be Deciphered?!! JACS Au. 2023. Vol. 3(3): 628–656.

Small-molecule inhibition and lysosomal degradation (LYTACs) of TNF- α to enhance immune checkpoint therapy

[Mayurdhvaj Parbatsinh Rathod](#), Avinash Mali, Seweryn Żubrowski, Aleksandra Kruk, Tadeusz Holak

University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, Department of Biomedical Chemistry, Wita Stwosza 63, 80–308 Gdańsk, Poland

mayurdhvajparbatsinh.rathod@phdstud.ug.edu.pl

Tumor necrosis factor- α (TNF- α) is a key cytokine that regulates inflammation, immune responses, and cancer progression. In the tumor microenvironment, persistent TNF signaling activates pathways such as NF- κ B, leading to increased expression of immune checkpoint molecules including PD-L1. Elevated PD-L1 on tumor cells interacts with PD-1 on T cells, promoting T-cell exhaustion and reducing anti-tumor immunity. Recent study suggest that TNF-driven inflammation contributes to resistance against immune checkpoint therapies, highlighting TNF as an attractive target for improving cancer immunotherapy¹. In cancer, TNF plays complex and context-dependent roles, as it can support anti-tumor immune responses but can also promote immune evasion, resistance to immunotherapy, and harmful immune-related side effects. For many years, therapies targeting TNF have relied mainly on biologic drugs such as antibodies. However, recent advances have challenged the idea that TNF cannot be targeted by small molecules. New chemical biology approaches, including small-molecule inhibitors and strategies that induce selective degradation through lysosome-targeting chimeras (LYTACs) of TNF, have opened new possibilities for therapeutic intervention². This project aims to investigate novel strategies to modulate TNF signaling using both small-molecule inhibitors and lysosome-targeting chimeras (LYTACs). Small-molecule TNF inhibitors can directly disrupt TNF activity and downstream inflammatory signaling, while LYTACs offer a complementary approach by selectively inducing lysosomal degradation of extracellular TNF. LYTAC-mediated degradation may provide sustained removal of TNF from the tumor microenvironment, resulting in more effective suppression of TNF-driven immune dysfunction. By combining TNF inhibition and targeted TNF degradation, this work seeks to reduce NF- κ B activation, decrease PD-L1 expression, restore T-cell function, and enhance anti-tumor immune responses. Ultimately, the project aims to establish TNF-targeted degradation and inhibition as innovative strategies to improve the efficacy of cancer immunotherapy and overcome resistance to current PD-1/PD-L1-based treatments.

[1] Domling, A., Holak, T.A. (2014). Programmed death-1: therapeutic success after more than 100 years of cancer immunotherapy. *Angew. Chem. Int. Ed.* 53, 2286-2288.

[2] Mikitiuk, M., Barczyński, J., Bielski, P., Arciniega, M., Tyrcha, U., Hec, A., Lipińska, A.D., Rychłowski, M., Holak, T.A., Sitar, T. (2023). IGF2 Peptide-Based LYTACs for Targeted Degradation of Extracellular and Transmembrane Proteins. *Molecules* 28, 7519.

Badania cytotoksyczności oraz odpowiedzi komórkowej na skojarzone działanie modyfikowanych nukleozydów o właściwościach radiosensybilizujących oraz inhibitorów kinazy białkowej zależnej od DNA (DNA-PK)

Natasza Masłowska, Magdalena Zdrowowicz-Żamojć, Piotr Storoniak

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

natasza.maslowska@phdstud.ug.edu.pl

W niniejszym projekcie wykorzystano skojarzone działanie radiosensybilizatorów i inhibitorów systemów naprawy DNA. Znanym radiosensybilizatorem jest 5-bromo-2'-deoksyurydyna (BrdU), należąca do grupy modyfikowanych nukleozydów. Związek ten ulega wcieleniu do DNA komórek nowotworowych a w wyniku ekspozycji na promieniowanie jonizujące, indukuje uszkodzenia DNA, w tym przede wszystkim pęknięcia helisy. Jednak aktywne systemy naprawcze skutecznie usuwają uszkodzenia ograniczając właściwości radiouczulające tego związku. Połączenie jego działania z inhibitorami DNA-PK (NU7441 i AZD7648), enzymu kluczowego dla wykrywania i naprawy dwuniciowych pęknięć DNA, ma na celu istotne zwiększenie radiosensytywności komórek nowotworowych.

Przeprowadzono badania cytotoksyczności inhibitorów DNA-PK (NU7441, AZD7648) i radiosensybilizatora (BrdU) wobec linii nowotworowych (DU-145, T47D) i zdrowych fibroblastów (HMF). Istotny statystycznie spadek żywotności komórek DU-145 zaobserwowano po 48h przy najwyższych stężeniach testowanych związków (5µM inhibitora i 10µM BrdU). W przypadku komórek T47D efekt cytotoksyczny zależał od czasu i stężenia, przy czym kombinacja z AZD7648 działała silniej (już od 0,1µM) niż z NU7441. Wykazano również cytotoksyczność wobec komórek HMF (głównie przy wyższych stężeniach po 24 i 48h).

Wykonano analizę cyklu komórkowego z wykorzystaniem cytometrii przepływowej na linii komórkowej DU-145. Zaobserwowano, że traktowanie komórek związkami AZD7648, NU7441 i BrdU w połączeniu z promieniowaniem jonizującym prowadzi do zmniejszenia odsetka komórek w fazie G0/G1 i zwiększenia udziału komórek w fazie G2/M cyklu komórkowego w porównaniu z komórkami kontrolnymi. Wyniki te wskazują na zatrzymanie cyklu komórkowego w fazie G2/M, będące odpowiedzią na nagromadzenie uszkodzeń DNA indukowanych przez zastosowaną terapię skojarzoną.

Przeprowadzono również wstępne badania klonogenne na linii komórkowej DU-145. W badaniach oceniano zdolność komórek do wznowy proliferacji po ekspozycji na promieniowanie jonizujące i po traktowaniu BrdU w skojarzeniu z inhibitorem AZD7648. Uzyskane wyniki wskazują, że analizowane związki zwiększają wrażliwość komórek raka prostaty na promieniowanie jonizujące. Najsilniejszy efekt obserwowano w przypadku jednoczesnego zastosowania radiosensybilizatora i inhibitora systemów naprawy DNA co czyni testowaną koncepcję radiouwrażliwiania bardzo obiecującą.

Dalsze badania obejmą wyznaczenie współczynników wzmocnienia dawki DEF oraz określenie charakteru interakcji pomiędzy badanymi związkami (efekt addytywny lub synergistyczny).

[1] J. Rak, L. Chomicz, J. Wiczek, K. Westphal, M. Zdrowowicz, P. Wityk, M. Żyndul, S. Makurat "Mechanisms of damage to DNA labeled with electrophilic nucleobases induced by ionizing or UV radiation" *The Journal of Physical Chemistry B* 119.26 (2015): 8227-8238.

[2] Y. Matsumoto, S. Imamichi, M. Fukuchi, S. Liu, W. Rujira, S. Kuniyoshi, K. Yoshida, Y. Mae, M. Sharma "Radiosensitization Strategies Through Modification of DNA Double-Strand Break Repair" *New Research Directions in DNA Repair*. IntechOpen, 2013

Synteza, charakterystyka oraz ocena neuroprotekcynnego i antyoksydacyjnego potencjału nowych koniugatów imatynibu z peptydami penetrującymi komórke

[Oliwia Bujak](#)¹, [Natalia Kaźmierczak](#)², [Katarzyna Kosznik-Kwaśnicka](#)², [Lidia Piechowicz](#)²,
[Jarosław Ruczyński](#)¹

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

² Gdański Uniwersytet Medyczny, Wydział Lekarski, 80-204 Gdańsk, ul. Dębowa 25

oliwia.bujak@phdstud.ug.edu.pl

Ograniczona zdolność przenikania leków przez barierę krew-mózg (BBB) oraz niewystarczająca penetracja komórkowa stanowią główną barierę w farmakoterapii ostrego udaru niedokrwienego mózgu. Niniejszy projekt odpowiada na to wyzwanie poprzez opracowanie innowacyjnych koniugatów typu *drug delivery system*, łączących pochodną imatynibu z peptydami penetrującymi komórke (CPP)¹. Przedstawiona strategia zakłada, że wykorzystanie chemii „click” katalizowanej jonami miedzi (I) (CuAAC) pozwoli na uzyskanie stabilnych układów o zwiększonej biodostępności, które skutecznie zniosą stres oksydacyjny i ochronią neurony przed kaskadą niedokrwieną².

W ramach części eksperymentalnej otrzymywane są peptydy metodą syntezy na nośniku stałym (SPPS) w strategii Fmoc/tBu, a następnie sprzęgane z funkcjonalizowanym lekiem. Postęp syntezy oraz czystość produktów podlegają ścisłej kontroli przy użyciu układu HPLC-MS, natomiast oczyszczanie związków prowadzi się z wykorzystaniem preparatywnej chromatografii cieczowej (RP-HPLC). Struktura i masa cząsteczkowa koniugatów są potwierdzane są za pomocą spektrometrii mas (ESI-MS). Profil biologiczny nowych cząsteczek obejmuje wyznaczenie potencjału antyoksydacyjnego (IC₅₀) w teście DPPH oraz ocenę zdolności do biernej dyfuzji przez sztuczne błony lipidowe w modelu PAMPA-BBB. Kluczowy etap badań, prowadzonych we współpracy z Gdańskim Uniwersytetem Medycznym, będzie stanowić ocena cytotoxyczności oraz właściwości neuroprotekcynnych koniugatów w modelu *in vitro* na linii komórek nerwowych HT22 poddanych działaniu czynników symulujących udar. Uzyskiwane wyniki otwierają nową ścieżkę w projektowaniu wielofunkcyjnych leków neuroprotekcynnych³.

Finansowanie: Uniwersytet Gdański (BMN 539-T060-B242-26)

[1] Ruczyński J, Wierzbicki PM, Kogut-Wierzbicka M, Mucha P, Siedlecka-Kroplewska K, Rekowski P. Cell-penetrating peptides as a promising tool for delivery of various molecules into the cells. *Folia Histochem Cytobiol.* 2014;52(4):257-269. DOI: 10.5603/FHC.a2014.0034

[2] Mazuryk J, Puchalska I, Koziński K, Ślusarz MJ, Ruczyński J, Rekowski P, Rogujski P, Płatek R, Wiśniewska MB, Piotrowski A, Janus Ł, Skowron PM, Piśkuła M, Sachadyn P, Rodziewicz-Motowidło S, Czupryn A, Mucha P. PTD4 Peptide Increases Neural Viability in an In Vitro Model of Acute Ischemic Stroke. *International Journal of Molecular Sciences.* 2021;22(11):6086. DOI:10.3390/ijms22116086

[3] Rusiecka I, Gągał I, Kocić I. Neuroprotective Activity of a Non-Covalent Imatinib+TP10 Conjugate in HT-22 Neuronal Cells In Vitro. *Pharmaceutics.* 2024;16:778. DOI:10.3390/pharmaceutics16060778

Molecular-Level Investigation of PFAS and Magnetite (Fe₃O₄): Orientation-Averaged Potentials of Mean Force and Interaction-Potential Descriptors

[Varun Gopalakrishnan Nair](#), Adam Sieradzan

University of Gdańsk, Faculty of Chemistry, 80-308, Gdańsk, Wita Stwosza 63

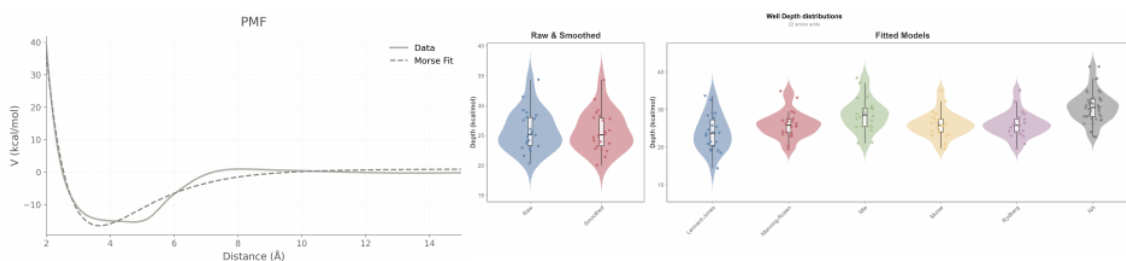
varun.gopalakrishnannair@phdstud.ug.edu.pl

Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) are synthetic organofluorine compounds whose stable C–F bonds make them persistent and mobile, driving their accumulation in water resources^{1,2}. Adsorption onto solid surfaces is a leading route for PFAS removal, yet its molecular driving forces remain poorly resolved³. Here a magnetite (Fe₃O₄) slab serves as a well-defined model surface to quantify PFAS adsorption at the atomistic level.

Using perfluorohexanoic acid (PFHxA) as a short-chain probe, we build a force-field model from electrostatic-potential-derived charges to capture its anisotropic interaction with the Fe₃O₄ surface⁴. For 18 randomly oriented PFHxA structures (each from sequential x, y, z rotations) the interaction energy is scanned along the surface–molecule separation *r*, and the profiles are combined into a one-dimensional potential of mean force (PMF) by a Boltzmann-weighted average, $W(r) = -kBT \ln[\sum_i w_i \exp(-E_i(r)/kBT)]$, with uniform weights *w_i* and each profile baseline-corrected so its long-range tail is zero. A numerically stable log-sum-exp evaluation lets the lowest-energy orientations dominate the PMF.

The PFHxA PMF shows a steep repulsive wall and a deep attractive minimum of ca. 15 kcal mol^{−1} near 3.7–4.7 Å, marking a strongly bound interfacial state⁵. Analytic potentials (Lennard-Jones, Morse, Mie, Manning–Rosen, Rydberg) were fitted to each PMF; the Morse form performed best ($R^2 \approx 0.95$, RMSE ≈ 1.7 kcal mol^{−1}), yielding a well depth of ≈ 17 kcal mol^{−1} at ≈ 3.7 Å.

Applied same analogy to twenty-two amino-acid probes on Fe₃O₄, the Morse, Rydberg and Manning–Rosen forms reproduce the well depths with small residuals, whereas Lennard-Jones deviates most, showing that an exponential description suits these interfaces better than the r^{-12}/r^{-6} form.



Rys. 1. (left) Orientation-averaged PMF for PFHxA on Fe₃O₄ with its Morse fit ($R^2 \approx 0.95$). (right) PMF well-depth distributions for 22 amino acids: raw/smoothed data and Lennard-Jones, Manning–Rosen, Mie, Morse and Rydberg fits

- [1] Buck RC, Franklin J, Berger U, Conder JM, Cousins IT, de Voogt P, Jensen AA, Kannan K, Mabury SA, van Leeuwen SPJ. Perfluoroalkyl and polyfluoroalkyl substances in the environment: terminology, classification, and origins. *Integr Environ Assess Manag.* 2011;7(4):513–541. doi:10.1002/ieam.258
- [2] Hegemann D, Southam A, Heuberger M, Navascués P. Potential and challenges to replace PFAS coatings considering safe and sustainable by design aspects: review and perspectives. *Plasma Process Polym.* 2026;23(1):e70125. doi:10.1002/ppap.70125
- [3] Hamza M, Ayinla RT, Elsayed I, Hassan EB. Understanding PFAS adsorption: how molecular structure affects sustainable water treatment. *Environments.* 2025;12(9):330. doi:10.3390/environments12090330
- [4] Barbosa GD, Tavares FW, Striolo A. Molecular interactions of perfluorinated and branched fluorine-free surfactants at interfaces: insights from a new reliable force field. *J Chem Theory Comput.* 2024. doi:10.1021/acs.jctc.4c00459
- [5] Bere K, Tóth Ugyonka H, Minofar B, Bakk B, Kovács T, Szőri M, Szilágyi I, Jedlovsky P. Adsorption mechanism of a perfluorinated carboxylic acid on charged polystyrene surfaces in aquatic environment: a combined experimental and computer simulation investigation. *J Phys Chem B.* 2025. doi:10.1021/acs.jpcc.5c03248

**SESJA SPRAWOZDAWCZA DOKTORANTÓW
SZKOŁY DOKTORSKIEJ
PRZY WYDZIALE CHEMII UG**

Gdańsk, 23.06.2026 r.



**Uniwersytet
Gdański**

