UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Wydział Chemii

INFORMATOR 2021/22



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Wydział Chemii

1981–2021

Wydział Chemii UJ
https://chemia.uj.edu.pl/
ul. Gronostajowa 2 30-387 Kraków

Sekretariat
sekretariat@chemia.uj.edu.pl
tel.: 12 686 2770

Dziekanat ds. studenckich
dziekanat@chemia.uj.edu.pl
tel.: 12 686 2758

WŁADZE WYDZIAŁU

Dziekan
prof. dr hab. Wojciech Macyk

Prodziekan ds. Ogólnych
dr hab. Jolanta Kochana, prof. UJ

Prodziekan ds. Dydaktyki
dr hab. Paweł Wydro, prof. UJ

Prodziekan ds. Badań i Współpracy
dr hab. Piotr Pietrzyk, prof. UJ

dane na dzień 30 września 2021

7 Krótka historia chemii na Uniwersytecie Jagiellońskim

19 Na pograniczu chemii, biologii i medycyny

33 Kataliza dla potrzeb współczesnego świata

43 Nowoczesna analityka chemiczna

53 Zaawansowane materiały i nanotechnologie

65 Nowoczesna synteza i fizykochemia organiczna

71 Zaawansowane narzędzia obliczeniowe. Modelowanie molekularne

79 Struktura Wydziału Chemii

97 Oferta i zaplecze badawcze



Szanowni Państwo,
Drodzy Czytelnicy,

oddajemy w Państwa ręce informator Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego. Wydziału, którego historia jest stosunkowo krótka w skali Uniwersytetu, ale chociaż działa on samodzielnie dopiero czterdzieści lat, jego początki sięgają osiemnastego wieku. Wydział, podobnie jak cały Uniwersytet stara się działać według dewizy: „Inspirowani przeszłością tworzymy przyszłość". Przeszłość to nie tylko wieki tradycji, stare mury i kroniki. To przede wszystkim ludzie i ich aktywny wkład w poznawanie i rozumienie wszechświata. Dzisiejszy Wydział Chemii jest jednym z najnowocześniejszych i najlepszych wydziałów chemicznych w Polsce. Nasi pracownicy, doktoranci i studenci realizują obecnie około 140 zewnętrznie finansowanych projektów badawczych, 12 dydaktycznych i kilka inwestycyjnych. Duża skuteczność w zdobywaniu środków na finansowanie badań skutkuje ich wysoką jakością, co w połączeniu z szeroko rozwiniętą współpracą międzynarodową wpływa na wysoką rozpoznawalność uniwersyteckiej chemii. W niniejszym opracowaniu chcielibyśmy przedstawić Państwu świat chemii, który jest naszą codziennością, a jednocześnie pasją. Chemii, która nie kojarzy się negatywnie z niezdrową żywnością, zanieczyszczeniami i innymi problemami dzisiejszego świata, ale nauki, która powinna i jest wykorzystywana w ich rozwiązywaniu oraz oferuje możliwości, które zapewniają nam wysoką jakość życia.

Informator podzieliliśmy na kilka części. Pierwsza przedstawia krótką historię chemii na Uniwersytecie Jagiellońskim. Kolejne sześć części to podróż przez główne obszary badawcze rozwijane przez naszych pracowników i doktorantów. W ostatnich rozdziałach przedstawiamy Państwu spis pracowników i ofertę badawczą, której zawartość może zainspirować do nawiązania współpracy. Ofertę tę stale rozbudowujemy, zwłaszcza teraz, gdy realizowany jest duży projekt inwestycyjny ATOMIN 2.0, dzięki któremu Wydział Chemii oraz Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej wzbogacą się o najwyższej klasy nowoczesną, często unikatową aparaturę badawczą. Warto wspomnieć, że Wydział Chemii jest jednym z najaktywniejszych wydziałów w sferze patentowania i komercjalizacji wyników badań przyczyniając się do sukcesu całego Uniwersytetu, który od kilku lat jest najbardziej innowacyjnym uniwersytetem Europy Środkowo-Wschodniej. Wydział Chemii jest także jedną z wiodących jednostek UJ pod względem wdrożeń i spółek zakładanych przez pracowników. Rozpoznawalność i uznanie Wydziału Chemii UJ w oczach uczniów i nauczycieli budują także cenne inicjatywy, takie jak *Próbna matura z Wydziałem Chemii*, organizacja ogólnopolskiej *Olimpiady Wiedzy Chemicznej z Wydziałem Chemii UJ* (dla szkół średnich) i ogólnopolskiej *Olimpiady Wiedzy Chemicznej dla Szkół Podstawowych* czy inne, liczne projekty edukacyjne.

Nowoczesność połączona z kompetentną i zaangażowaną kadrą akademicką, wysoki poziom badań naukowych potwierdzony najwyższym ministerialnym znakiem jakości A+, składają się na jakość studiów, które oferuje Wydział. Ten sukces, wypracowywany latami, wynika z zaangażowania, ambicji i pasji naszych pracowników, doktorantów oraz studentów.

Ostatnie lata to również czas istotnych zmian w ofercie dydaktycznej Wydziału. Uruchomiliśmy dwa nowe kierunki studiów – *chemia medyczna* i *chemia zrównoważonego rozwoju*. Czwarty raz z rzędu kierunek *chemia* uzyskał pierwsze miejsce w rankingu *Perspektyw*. W tym samym rankingu kierunek *ochrona środowiska* był również kilkakrotnie wyróżniany najwyższą lokatą. Nasze studia uzyskały również akredytacje European Chemistry Thematic Network: Eurobachelor i Euromaster dla studiów I i II stopnia kierunków *chemia* i *chemia medyczna* oraz Chemistry Doctorate Eurolabel dla studiów doktoranckich kierunku chemia.

Głęboko wierzę, że oferta Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, którą tutaj przedstawiamy, będzie atrakcyjna zarówno dla czytelników poszukujących współpracy w dziedzinie chemii, jak również dla naszych przyszłych studentów.

Wojciech Macyk
Dziekan Wydziału Chemii
lipiec 2021

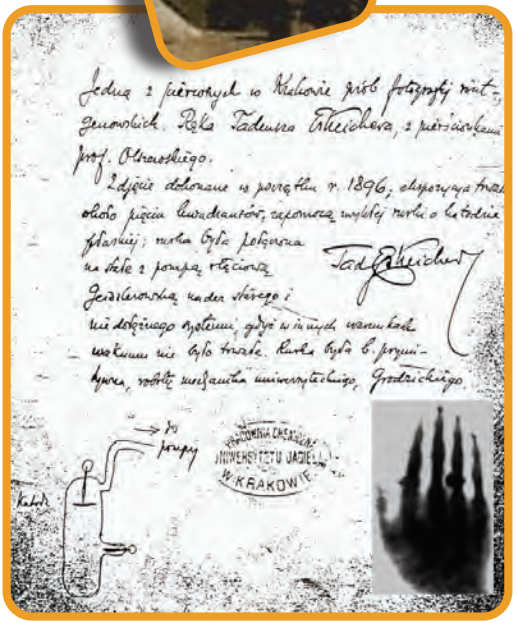
Krótka historia chemii na Uniwersytecie Jagiellońskim



Chemia jako samodzielna dyscyplina naukowa pojawiła się w Akademii Krakowskiej, założonej w 1364 roku przez króla Kazimierza Wielkiego, dopiero w XVII wieku. Wydarzeniem uznawanym za narodziny chemii uniwersyteckiej w Krakowie było utworzenie Katedry Historii Naturalnej i rozpoczęcie **1 października 1783 roku** wykładów z historii naturalnej i chemii. Chemia pełniła wówczas funkcję pomocniczą w odniesieniu do innych nauk: botaniki, zoologii, mineralogii, farmacji, medycyny. Fakt ten znalazł odzwierciedlenie w usytuowaniu chemii jako nauki w strukturze Uniwersytetu. Wydzielona z Katedry Historii Naturalnej Katedra Chemii została połączona z Katedrą Farmacji i przeniesiona na Wydział Lekarski, by następnie, w roku **1851**, zostać oddzieloną od Katedry Farmacji i na dziesiątki lat pozostać w strukturze Wydziału Filozoficznego.

Wiek XIX stanowił okres ważnych odkryć chemicznych na świecie. Dużym zainteresowaniem uczonych cieszyły się badania gazów w niskich temperaturach. Pomimo starań nie udało się uzyskać ciekłego tlenu, azotu, wodoru, tlenku węgla, tlenku azotu i metanu, wobec czego sądzono, iż gazy te są trwałe (doskonałe) i nie uda się ich skroplić przy użyciu bardzo wysokich ciśnień i równoczesnym oziębianiu. W **1883** roku, po zaledwie kilkumiesięcznej współpracy Karola Olszewskiego z Zygmuntem Wróblewskim, krakowscy uczeni dokonali przełomu w nauce, skraplając tlen, azot i tlenek węgla. Olszewski i Wróblewski zastosowali w prowadzonych eksperymentach własne oryginalne rozwiązania (środkiem chłodzącym był wrzący w próżni





etylen), które w skromnych warunkach krakowskiego laboratorium doprowadziły do uzyskania rezultatów, jakich przez lata nie udało się osiągnąć w bogato wyposażonych zagranicznych pracowniach kriogenicznych. Uczeni krakowscy zyskali światową sławę, a Kraków nazwano „europejskim biegunem zimna".

Profesor Olszewski interesował się również rozwojem nauk fizykochemicznych na świecie i w kilka tygodni po ogłoszeniu pracy Roentgena o nowym rodzaju promieniowania elektromagnetycznego, w styczniu **1896** roku, otrzymał w swoim laboratorium promienie X, które wspólnie z kolegami z Wydziału Lekarskiego zastosował do celów medycznych. Prace te uważane są za początki radiologii na ziemiach polskich.

W **1891** roku Katedrę Chemii podzielono na dwa zakłady: I Zakład Chemiczny i II Zakład Chemiczny. Tematykę badawczą I Zakładu pod kierownictwem prof. Olszewskiego stanowiły zagadnienia z zakresu kriogeniki, chemii nieorganicznej, chemii analitycznej (analiza chemiczna, chemia sądowa) i elektrochemii. II Zakład Chemiczny zajmował się badaniami z zakresu chemii organicznej i chemii farmaceutycznej. W roku **1911** z II Zakładu Chemicznego wyodrębniono III Zakład Chemiczny – pierwszą w Polsce placówkę zajmującą się problematyką chemii fizycznej.

W **1913** roku narodziła się w Krakowie idea utworzenia na ziemiach polskich Towarzystwa Fizyczno-Chemicznego. Kiedy po odzyskaniu niepodległości utworzono Polskie Towarzystwo Chemiczne, jego pierwszym prezesem został Leon Marchlewski – profesor chemii ogólnej i fizjologicznej związany z Wydziałem Lekarskim UJ, a Karol Dziewoński – profesor chemii organicznej i kierownik II Zakładu Chemicznego UJ, znalazł się wśród członków pierwszego zarządu PTCh.

W latach okupacji hitlerowskiej Uniwersytet Jagielloński został oficjalnie zamknięty. W dniu **6 listopada 1939** pod pretekstem rozpoczęcia nauczania w nowym roku akademickim okupanci aresztowali 183 przybyłych na spotkanie pracowników Uniwersytetu Jagiellońskiego (tzw. Sonderaktion Krakau). Wielu z nich wywieziono do obozów koncentracyjnych w Sachsenhausen i Dachau. Wobec potrzeby kontynuowania studiów uniwersyteckich w roku **1942** utworzono w Krakowie uniwersytet podziemny. Konspiracyjne studia chemiczne odbywały się wówczas w ramach jawnie działającej spółdzielni produkcyjnej „Freege", w której zatrudnieni byli zarówno wykładowcy, jak i studenci. Wykłady i ćwiczenia z chemii na tajnym uniwersytecie prowadzono nie tylko dla chemików. Brali w nich udział także studenci Wydziału Lekarskiego i Wydziału Farmaceutycznego.

Po wyzwoleniu Krakowa Uniwersytet Jagielloński natychmiast zaczął odbudowywać swoje struktury. Kiedy w październiku **1945** roku inaugurowano nowy rok akademicki, działalność rozpoczęły, tak jak przed wojną, trzy zakłady chemiczne: I Zakład Chemiczny (chemia nieorganiczna i analityczna), II Zakład Chemiczny (chemia organiczna) i III Zakład Chemiczny (chemia fizyczna i elektrochemia). Kadrę badawczo-dydaktyczną stanowiło wówczas 24 pracowników, wśród których było tylko dwóch profesorów i dwóch docentów.

Wraz z rozszerzaniem się podejmowanej tematyki badawczej powstawały nowe katedry.
W **1948** roku powstała Katedra Chemii Jądrowej, w **1950** roku – Katedra Chemii Ogólnej, w **1951** roku – Katedra Technologii Chemicznej, w **1952** roku – Katedra Chemii Teoretycznej, a w **1963** roku – Katedra Krystalochemii i Krystalofizyki. W latach **1952–1953** uniwersytecka chemia przeniosła się do nowej siedziby (obecnie ul. Ingardena 3).



W **1956** roku na Wydziale Matematyki, Fizyki i Chemii utworzono Instytut Chemii UJ, który skupiał działające na Uniwersytecie Jagiellońskim katedry chemiczne.

W **1981** roku zapoczątkował swoją działalność Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego. Przez lata prowadził on studia na kierunku chemia, jednak wraz z rozwojem nowych dyscyplin naukowych i podejmowaniem tematów interdyscyplinarnych otwarto nowe kierunki studiów – ochrona środowiska (**1993**), chemia medyczna (**2015**) oraz chemia zrównoważonego rozwoju (**2019**).





W **2010** roku w rankingu Centre for Higher Education Development Wydział Chemii UJ znalazł się w prestiżowej Excellence Group najlepszych wydziałów chemicznych europejskich uczelni.

Baza badawcza i dydaktyczna Wydziału Chemii została znacznie unowocześniona dzięki projektom z funduszy strukturalnych, których celem była modernizacja i rozbudowa zaplecza naukowego i dydaktycznego. Realizowane w latach **2009–2015** projekty przyczyniły się istotnie do podniesienia jakości kształcenia. Od **2013** roku Wydział Chemii UJ zaliczany jest nieprzerwanie do grona najlepszych jednostek naukowo-badawczych w kraju, wyróżnionych kategorią A+ nadawaną przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

W **2017** roku Wydział Chemii UJ zmienił swoją siedzibę, przenosząc się na teren Kampusu 600-lecia Odnowienia Uniwersytetu Jagiellońskiego. Budynek wydziału zajmuje obecnie łączną powierzchnię około 28 tysięcy metrów kwadratowych, z wydzielonymi częściami dydaktycznymi, badawczymi, administracyjno-socjalnymi oraz technicznymi. Obiekt jest wyposażony w zaawansowane systemy automatycznego sterowania i został zaprojektowany z troską o środowisko naturalne. Charakteryzuje się niskim zapotrzebowaniem na energię cieplną, a ekologiczny ogród na dachu pozwala latem na odpoczynek wśród zieleni, zimą zaś, stanowi dodatkowe zabezpieczenie przed utratą ciepła.

Największą wartość każdej instytucji stanowią ludzie, którzy ją tworzą i dla niej pracują. Nie jest możliwe, by wymienić tutaj wszystkie ich zasługi i prace, jakie wykonali dla dobra Uniwersytetu. Wśród uczonych piastujących najwyższe godności w uniwersyteckiej społeczności byli również chemicy. Rektorami Uniwersytetu Jagiellońskiego byli profesorowie Florian Sawiczewski, Emilian Czyrniański i Leon Marchlewski. Prorektorami Uniwersytetu w czasie ostatniego półwiecza byli profesorowie: Adam Bielański, Alojzy Gołębiewski, Krystyna Dyrek, Stanisław Hodorowicz i Maria Nowakowska. 30 stycznia 2019. Senat Uniwersytetu Jagiellońskiego wybrał, spośród całej społeczności akademickiej, troje członków pierwszej Rady Uczelni. Wśród nich znalazła się prof. Grażyna Stochel z Wydziału Chemii UJ.

A. Rafalska-Łasocha, *Maria Skłodowska-Curie i jej kontakty ze środowiskiem krakowskim*, PAU, Kraków 2015

Dziekani Wydziału Chemii

1981–1984

dziekani
prof. dr hab. Alojzy Gołębiewski
doc. dr hab. Stanisław Hodorowicz
doc. dr hab. Zofia Stasicka

prodziekani
doc. dr hab. Andrzej Parczewski
doc. dr hab. Zofia Stasicka
doc. dr hab. Tadeusz Senkowski

1984–1987

dziekan
doc. dr hab. Zofia Stasicka (od 1987 profesor)

prodziekani
doc. dr hab. Krystyna Dyrek (od 1986 profesor)
doc. dr hab. Stanisław Hodorowicz (od 1987 profesor)
doc. dr hab. Piotr Petelenz
doc. dr hab. Krystyna Bogdanowicz-Szwed
doc. dr hab. Roman Dziembaj

1987–1990

dziekan
prof. dr hab. Stanisław Hodorowicz

prodziekani
doc. dr hab. Roman Nalewajski
prof. dr hab. Krystyna Dyrek
doc. dr hab. Janusz Jamrozik

1990–1993

dziekan
prof. dr hab. Stanisław Hodorowicz

prodziekani
doc. dr hab. Roman Nalewajski (od 1991 profesor)
doc. dr hab. Maria Nowakowska
dr hab. Marek Frankowicz

1993–1996

dziekan
dr hab. Maria Nowakowska, prof. UJ

prodziekani
doc. dr hab. Piotr Petelenz (od 1995 profesor)
dr hab. Roman Dziembaj, prof. UJ (od 1996 profesor)
dr hab. Marek Frankowicz

1996–1999

dziekan
dr hab. Maria Nowakowska (od 1997 profesor)

prodziekani
prodziekani: prof. dr hab. Piotr Petelenz
prof. dr hab. Roman Dziembaj
doc. dr hab. Barbara Oleksyn

1999–2002

dziekan
prof. dr hab. Roman Dziembaj

prodziekani
dr hab. Leonard M. Proniewicz (od 2002 profesor)
dr hab. Grażyna Stochel (od 2001 profesor)
doc. dr hab. Janusz Jamrozik

2002–2005

dziekan
prof. dr hab. Leonard M. Proniewicz

prodziekani
prof. dr hab. Paweł Kościelniak
prof. dr hab. Grażyna Stochel
dr hab. Janusz Jamrozik, prof. UJ

2005–2008

dziekan
prof. dr hab. Leonard M. Proniewicz

prodziekani
prof. dr hab. Paweł Kościelniak
dr hab. Artur Michalak
prof. dr hab. Zbigniew Sojka

2008–2012

dziekan
prof. dr hab. Grażyna Stochel

prodziekani
dr. hab. Barbara Rys
dr hab. Artur Michalak
prof. dr hab. Zbigniew Sojka

2012–2016

dziekan
prof. dr hab. Grażyna Stochel

prodziekani
dr hab. Barbara Rys
dr hab. Andrzej Eilmes
dr hab. Lucjan Chmielarz (od 2016 profesor)

2016–2020

dziekan
prof. dr hab. Piotr Kuśtrowski

prodziekani
prof. dr hab. Wojciech Macyk
dr hab. Jolanta Kochana, prof. UJ
dr hab. Andrzej Eilmes, prof. UJ

2020–2024

dziekan
prof. dr hab. Wojciech Macyk

prodziekani
dr hab. Jolanta Kochana, prof. UJ
dr hab. Paweł Wydro, prof. UJ
dr hab. Piotr Pietrzyk, prof. UJ



Na pograniczu chemii, biologii i medycyny



Marzenie o wiecznej młodości stanowiło jeden z głównych motorów rozwoju kultury i sztuki. Przez wiele stuleci nauka nie wkraczała na ten obszar, wydawało by się – zarezerwowany dla działań magów i alchemików. Intensywny rozwój nowoczesnej medycyny stał się możliwym dzięki zrozumieniu procesów fizycznych i chemicznych zachodzących w materii ożywionej. Zrozumienie praw fizyki i świata reakcji chemicznych pozwala nam bezpiecznie poruszać się na pograniczu chemii i biologii. Pragniemy zrozumieć procesy, które decydują o istnieniu życia, definując bowiem mechanizmy procesów odpowiedzialnych za rozwój i degradację organizmu, wkraczamy w świat cząsteczek, których właściwości wpływają na ich przebieg. Interesują nas zatem procesy chemiczne zachodzące w organizmach żywych, a związane z syntezą i rozkładem związków organicznych, związków koordynacyjnych, przemianami energetycznymi, jak i przekazywaniem informacji genetycznej.

Zespoły zajmujące się tematyką z pogranicza chemii, biologii i medycyny to prężnie rozwijająca się interdyscyplinarna, międzynarodowa grupa badawcza. Zaangażowanie w badania biologiczne i medyczne wymaga od nas dogłębnej wiedzy z różnych dziedzin nauki. Jako chemicy jesteśmy specjalistami w dziedzinie syntezy zaawansowanych związków organicznych i nieorganicznych, ich fizykochemicznej charakterystyce, jak i w badaniach strukturalnych dostarczających informacji na temat oddziaływania biocząsteczek między sobą oraz ze związkami egzogennymi. W naszych badaniach wykorzystujemy elektronową spektroskopię absorpcyjną i emisyjną, obrazowanie w zakresie promieniowania widzialnego, bliskiej podczerwieni, podczerwieni oraz ramanowskie, mikroskopię sił atomowych (AFM), mikroskopię optyczną bliskiego pola (SNOM), spektroskopię ramanowską wzmocnioną powierzchnią (SERS), spektroskopię ramanowską z próbnikiem światłowodowym i spektroskopie chiralooptyczne: wibracyjny dichroizm kołowy (VCD) i ramanowską aktywność optyczną (ROA). Nie są nam obce także zagadnienia oraz umiejętności z pogranicza biofizyki oraz biochemii.



Zespół Fizykochemii Koordynacyjnej i Bionieorganicznej

Badamy kinetykę i mechanizmy reakcji bionieorganicznych /**Zespół Fizykochemii Koordynacyjnej i Bionieorganicznej**/ biegnących z udziałem endo- i egzogennych związków metali d-elektronowych o znaczeniu medycznym lub środowiskowym. Otrzymywane przez nas związki koordynacyjne, metaloorganiczne oraz nieorganiczne i hybrydowe organiczno-nieorganiczne nanostruktury modyfikowane związkami koordynacyjnymi (potencjalne farmaceutyki lub toksykanty) badane są nie tylko pod względeem ich właściwości fizykochemicznych i reaktywności chemicznej ale również pod kątem aktywności biologicznej. Testy biologiczne wykonywane są zarówno na liniach komórkowych (in vitro) w pracowni chemii biomedycznej, jak i na zwierzętach doświadczalnych (in vivo), we współpracy z innymi jednostkami badawczymi. Pragniemy, aby zaprojektowane przez nas związki i materiały znalazły swoje zastosowanie w celowanych terapiach chorób cywilizacyjnych (choroby nowotworowe, choroby układu krwionośnego, choroby autoimmunologiczne czy zakażenia lekoopornymi mikroorganizmami), teranostyce, czyli połączeniu diagnostyki i terapii, która może być podstawą nowoczesnej, spersonalizowanej medycyny precyzyjnej, medycyny „szytej na miarę". Wyjaśniany jest zarówno szczegółowy mechanizm reaktywności chemicznej, jak i biologicznej aktywności (cytotoksyczność, lokalizacja wewnątrzkomórkowa, mechanizmy śmierci komórkowej, wpływ na podstawowe procesy biochemiczne jak aktywność enzymatyczna, replikacja DNA). Ta ścieżka badawcza dotyczy nie tylko charakterystyki fizykochemicznej otrzymanych związków, ale również badań nad zjawiskiem oporności wielolekowej, doskonalenia zastosowanych formulacji farmaceutycznych, jak również korzystania z najnowszych osiągnięć chemii materiałów i nanotechnologii na różnych etapach badań potencjalnych nośników oraz materiałów do zastosowań biomedycznych. W kontekście zastosowań diagnostycznych i terapeutycznych otrzymujemy również nanokompozyty nieorganiczno-organiczne (materiały hybrydowe oparte na nanocząstkach metali, np. Ag, Au, Cu, tlenków metali np. TiO_2, ZnO, oraz biopolimerach, takich jak chitozan czy alginian sodu) testowane jako nowe biozgodne i antybakteryjne materiały do walki z patogenami powodującymi zakażenia. Wykorzystujemy metaloproteiny i metalokofaktory jako nośniki środków terapeutycznych, dokonujemy ich modyfikacji przy wykorzystaniu peptydów i białek transportujących. Rozwijamy także tematykę dotyczącą wpływu nieorganicznych zanieczyszczeń powietrza, zwłaszcza pyłów zawieszonych (PM) oraz nanocząstek nieorganicznych na rozwoj chorób autoimmunologicznych i nowotworowych.



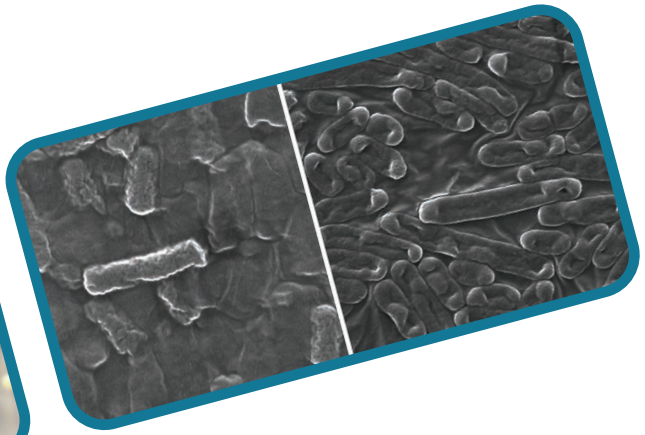
immunoterapia

Naszą aktywność kierujemy także na obszar niskocząsteczkowych związków chemicznych, inhibitorów oddziaływań białko białko, które mogą stanowić potencjalne leki przeciwnowotworowe. Strategie polegające na mobilizacji układu odpornościowego do walki z nowotworem dowiodły swej skuteczności w badaniach klinicznych, prowadząc do trwałej odpowiedzi terapeutycznej i stanowiąc ogromny przełom w walce z nowotworami. Przedmiotem naszych badań są białka odgrywające kluczową rolę w cyklu komórkowym, jak również białka regulatorowe mechanizmu odpowiedzi immunologicznej. Jednym z najważniejszych naszych osiągnięć /**Zespół Biologii Chemicznej i Projektowania Leków**/ jest otrzymanie struktury krystalograficznej białka immunologicznego punktu kontrolnego PD-1 wraz z jego naturalnym ligandem: białkiem PD-L1. Szczególne znaczenie tego osiągnięcia polega na tym, że to właśnie białko PD-L1 jest często wykorzystywane przez nowotwór do blokowania przeciwnowotworowych funkcji układu

Zespół Biologii Chemicznej i Projektowania Leków

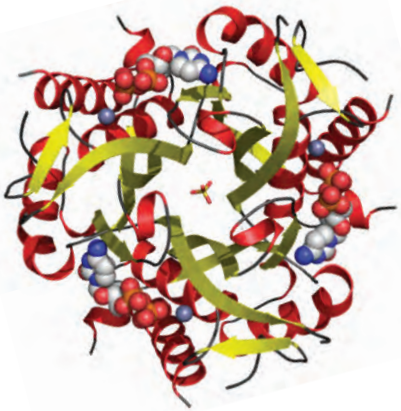
Zespół Nanotechnologii Polimerów i Biomateriałów





inżynieria tkankowa

odpornościowego. Współczesne immunoterapie przeciwnowotworowe oparte są na przeciwciałach monoklonalnych, które selektywnie blokują receptory immunologicznych punktów kontrolnych. W 2018 właśnie za postępy w badaniach nad terapiami wykorzystującymi białka immunologicznych punktów kontrolnych przyznana została Nagroda Nobla w dziedzinie medycyny i fizjologii.



W swoich badaniach szeroko wykorzystujemy zdobycze nanotechnologii /**Zespół Nanotechnologii Polimerów i Biomateriałów**/. Projektujemy nanostrukturalne funkcjonalne materiały polimerowe w kontekście otrzymania nowych leków skierowanych przeciwko wirusowi HSV-1 oraz Zika. Badamy związki wpływające na krzepliwość krwi – antykoagulanty i ich inhibitory. Otrzymujemy nośniki substancji biologicznie aktywnych i syntetyzujemy związki polimerowe, potencjalnie przydatne w inżynierii tkankowej. Intensywnie pracujemy nad pozyskaniem celowanych kontrastów do obrazowania z wykorzystaniem rezonansu magnetycznego lub układów teranostycznych oraz fotouczulaczy do zastosowań w terapii fotodynamicznej (PDT, aPDT).

nanocząstki

Grupa Chemii Powierzchni i Materiałów





W obszarze materiałów do zastosowań biomedycznych rozwijamy także kierunki badawcze związane z modyfikacją i funkcjonalizacją podłoży polimerowych do hodowli komórek, pokryć modyfikujących przyleganie mikroorganizmów do powierzchni metalicznych, powierzchni implantów w celu zapewnienia najistotniejszych funkcji: antykorozyjnej, antybakteryjnej, biozgodności, terapeutycznej.

W szczególności nasza aktywność w tym obszarze obejmuje syntezę i osadzanie nanocząstek substancji biologicznie aktywnych na powierzchniach, badania oddziaływania nanocząstek z powierzchnią ścian bakterii, badania kolonizacji powierzchni przez różne szczepy bakterii. Opracowaliśmy wielowarstwową powłokę ochronną do zabezpieczania powierzchni metalowych materiałów implantacyjnych z funkcją kontrolowanego uwalniania leków /**Grupa Chemii Powierzchni i Materiałów**/.



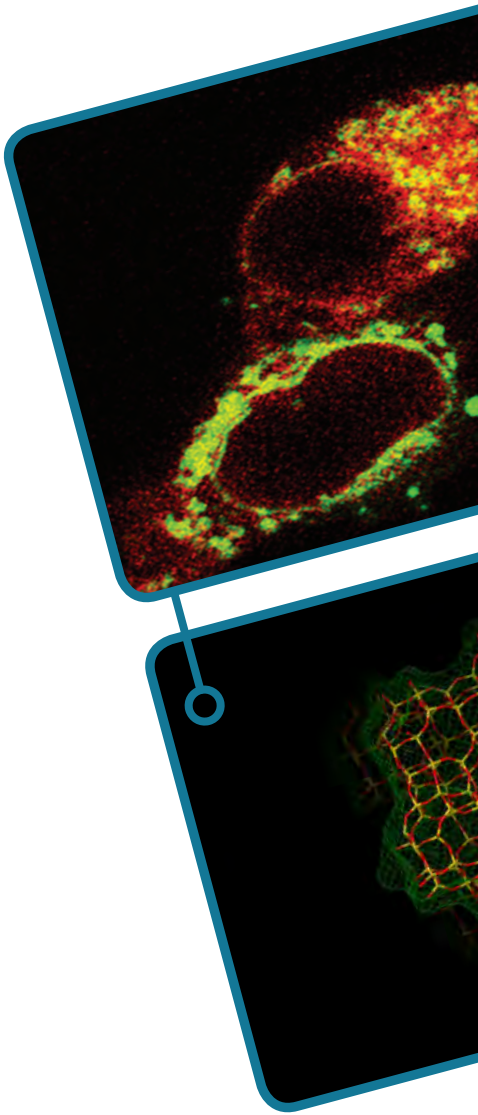




powłoka ochronna

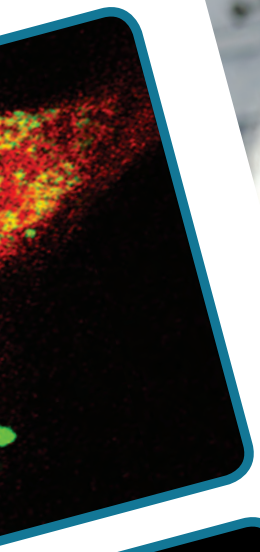
kontrolowane uwalnianie leków

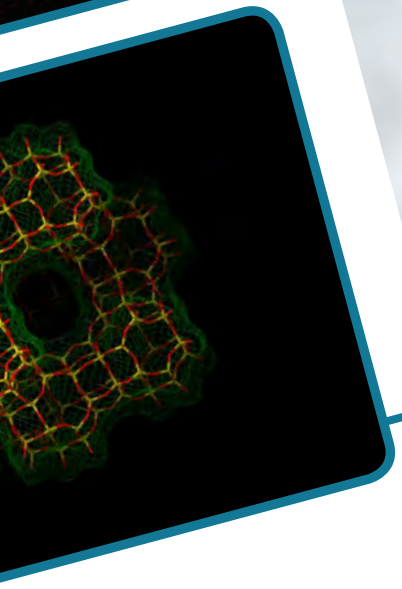
inżynieria tkankowa



Jednym z naszych celów jest także zbadanie możliwości zastosowania najnowszych zaawansowanych materiałów porowatych (zeolitów 3D oraz 2D, zeotypów, materiałów typu MOF i uporządkowanych krzemionkowych materiałów mezoporowatych) jako nośników substancji leczniczych przeznaczonych do podania doustnego, inhalacji, implantacji oraz stosowania miejscowego /**Grupa Chemii Zeolitów**/. Oprócz oczywistej możliwości powolnego uwalniania leków, zastosowanie różnych grup materiałów porowatych jako nośników substancji terapeutycznych jest podyktowane ich specyficznymi właściwościami, które umożliwiają badanie natury oddziaływania fragmentów wprowadzonych cząsteczek gości z różnymi częściami szkieletu gospodarza, co jest kluczowe dla charakterystyki nowej grupy matrycowych postaci leku zawierających nośniki o predefiniowanej strukturze wewnętrznej.

Grupa Chemii Zeolitów







Biozgodność

substancje bioaktywne





Prowadzone przez nas eksperymenty koncentrują się na precyzyjnej deskrypcji oddziaływań międzycząsteczkowych w modelowych błonach komórkowych, ich organizacji molekularnej oraz badaniu mechanizmu aktywności leków antybakteryjnych, antygrzybicznych, przeciwnowotworowych, przeciwzapalnych oraz innych substancji bioaktywnych działających na poziomie membranowym, takich jak naturalne ekstrakty roślinne i ich wybrane składniki o udowodnionej aktywności antymikrobiologicznej /**Zespół Fizykochemii Powierzchni** i **Zespół Fizykochemicznych Badań Środowiskowych**/. Układami stosowanymi w modelowaniu biomembran są zarówno monowarstwy (filmy Langmuira), jak i dwuwarstwy lipidowe (liposomy). Kluczowymi narzędziami do charakterystyki właściwości, struktury i mechanizmu działania związków o potencjalnym znaczeniu medycznym są metody spektroskopowe i mikroskopowe.



Zespół Fizykochemii Powierzchni

Zespół Fizykochemicznych Badań Środowiskowych

Zespół Obrazowania Ramanowskiego

Grupa Spektroskopii Chiraloptycznej

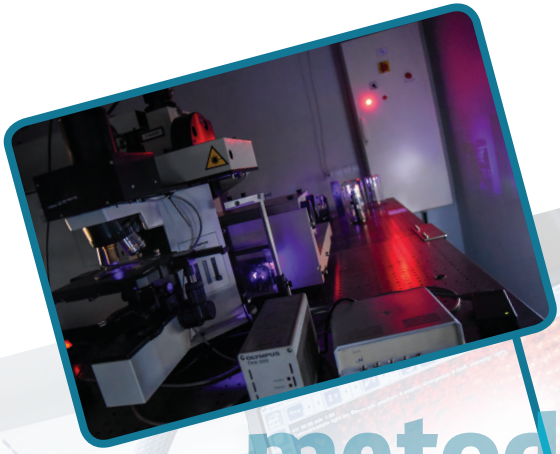
W naszych badaniach stosujemy panel metod komercyjnych (obrazowanie ramanowskie i FT-IR, AFM, SNOM, SERS, VCD, ROA), a także rozwijamy nowe techniki eksperymentalne: mikroskopię stymulowanego rozpraszania ramanowskiego (SRS), rezonansową ramanowską aktywność optyczną (RROA), spektroskopię ramanowską wzmocnioną na ostrzu (TERS) czy spektroskopię ramanowską z próbnikiem światłowodowym i immuno-spektroskopię ramanowską wzmocnioną powierzchnią (iSERS) /**Zespół Obrazowania Ramanowskiego**/. Rozwijamy metodologię spektroskopowej diagnozy chorób cywilizacyjnych (cukrzyca, miażdżyca, nadciśnienie, przerzutowość nowotworowa, stłuszczenie wątroby, niewydolność serca, stenoza aortalna) i stosujemy ją do określenia spektroskopowych markerów zmian chemicznych, a także badania leków o działaniu protekcyjnym na układ krwionośny. Analizujemy preparaty tkankowe ex vivo w licznych zwierzęcych modelach chorób cywilizacyjnych, a także pobrane od pacjentów. W badaniach modeli komórkowych in vitro analizujemy odpowiedź komórek na czynniki zapalne, stres oksydacyjny, a także śledzimy oddziaływanie komórek z chemioterapeutykami. Badania te mają na celu zdefiniowanie spektroskopowych markerów chorób cywilizacyjnych, a także lepsze zrozumienie mechanizmów rozwoju patologii układu krwionośnego oraz działania związków protekcyjnych.

Wykorzystujemy spektroskopię (chiralooptyczną i nie tylko) i mikroskopię do badania próbek biologicznych, począwszy od układów modelowych i analizy podstawowych zjawisk, przez hodowle komórkowe, aż po badania tkanek. Zainteresowania naukowe **Grupy Spektroskopii Chiralooptycznej** oscylują wokół tematów: badania chiralnych supracząsteczek, zjawiska amplifikacji i indukcji chiralności, okołonaczyniowej tkanki tłuszczowej i jej roli w patologiach naczyniowych oraz patogenezy HPV i raka szyjki macicy.

biomembrany

Prowadzimy także badania zdrowych komórek krwi oraz wybranych komórek w stanie patologicznym w celu określenia markerów na przykład aktywowanych limfocytów w infekcji wirusowej czy erytrocytów w zakażeniu pasożytniczym. Przy użyciu metod spektroskopowych badamy różne obszary zdrowego mózgu oraz patologicznych tkanek mózgowia w zaburzeniach neurodegeneracyjnych w modelu zwierzęcym, a także patologicznej soczewki oka ludzkiego. Metodą spektroskopii ramanowskiej charakteryzujemy właściwości nanomateriałów polimerowych i materiałów węglowych o potencjalnych zastosowaniach medycznych / **Zespół Spektroskopii Oscylacyjnej**/.

Ważnym aspektem badań biochemicznych jest poznanie zależności między trójwymiarową strukturą makrocząsteczek a rolą, jaką pełnią. Analiza strukturalna jest szeroko wykorzystywaną metodą zarówno do badania małych cząsteczek o znaczeniu biologicznym, jak i makrocząsteczek /**Zespół Biokrystalografii**/. Celem eksperymentów krystalograficznych jest nie tylko wyznaczenie przestrzennej budowy cząsteczek, ale również określenie ich właściwości wynikających z wyznaczonej przez nas struktury. Co więcej, badania strukturalne pozwalają na uzyskanie informacji o funkcji i potencjalnych kierunkach praktycznego wykorzystania, na przykład, białek czy też zaprojektowanie i uzyskiwanie struktur białkowych o zmodyfikowanych i unikalnych właściwościach. Analiza strukturalna pomaga w znalezieniu odpowiedzi na pytania dotyczące działania enzymów, których upośledzenie funkcji lub mutacje są związane z występowaniem u ludzi tzw. chorób rzadkich. Metody inżynierii genetycznej wykorzystujemy do projektowania celowych mutacji w sekwencji białek w celu zwiększenia ich powinowactwa oraz selektywności wiązania wybranych leków.



metody inżynierii genetycznej



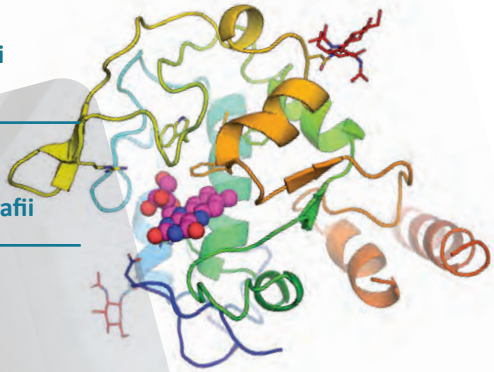
Zespół Spektroskopii Oscylacyjnej

Zespół Biokrystalografii

Zespół Fizykochemii Powierzchni

Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych





struktura makrocząsteczek

Uzupełnieniem wyników doświadczalnych są eksperymenty in silico, czyli symulacje komputerowe modelowych układów naśladujących badane układy rzeczywiste. Uzyskane tą drogą informacje pozwalają wyjaśnić mechanizmy reakcji, uzyskać molekularny obraz oddziaływań międzycząsteczkowych oraz określić ich wpływ na strukturę i dynamikę badanych układów.

Na uwagę zasługuje również rozwój nowej, spójnej metodologii badawczej opartej na technikach symulacyjnych, stosowanych do opisu błon komórkowych /**Zespół Fizykochemii Powierzchni**, **Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych**/. Atomistyczne informacje uzyskane z symulacji metodami klasycznej dynamiki molekularnej (MD) wydatnie uzupełniają wyniki eksperymentalne o elementy niedostępne w bezpośrednich pomiarach doświadczalnych. Dynamika molekularna jest techniką obliczeniową, która pozwala modelować błony komórkowe utworzone na granicy faz woda powietrze, w tzw. rozdzielczości atomowej. Podobnie jak w rzeczywistym eksperymencie, eksperyment komputerowy pozwala nam w pełni kontrolować skład układu modelowego i warunki fizykochemiczne eksperymentu. Metody obliczeniowe dostarczają informacji, które nie są bezpośrednio dostępne



wolne rodniki

Zespół Badań Materiałów Roślinnych

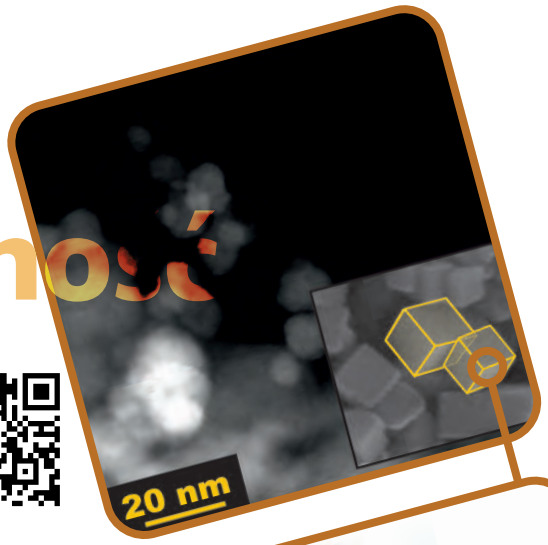
z eksperymentu.

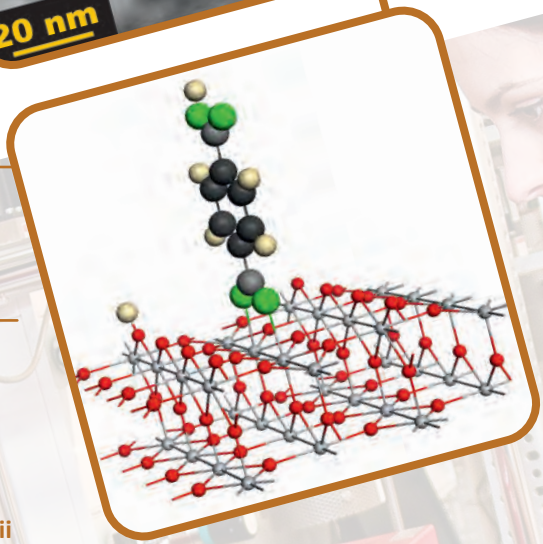
Za pierwsze i główne czynniki odpowiedzialne za uszkodzenia organizmów, a których akumulacja w organizmie prowadzi do śmierci, uznano wolne rodniki, w szczególności aktywne formy tlenu. W cząsteczkach tych występuje jeden niesparowany elektron, zatem charakteryzują się wysoką reaktywnością. Pojawiają się w komórkach żywych głównie jako uboczny produkt oddychania tlenowego, wadliwego metabolizmu czy czynników zewnętrznych (promieniowanie jonizujące).

Prowadzimy badania stabilnych rodników organicznych, biorących udział tak w procesach życiowych roślin, jak i generowanych podczas stresów środowiskowych. Mają one zdolność dezaktywowania wolnych rodników. Badamy również wpływ składu chemicznego skrobi na procesy przebiegające w trakcie jej modyfikacji i określamy, w jakim stopniu zamienia się jej struktura i jak przebiega proces generacji rodników. Proces ten śledzony jest na poziomie molekularnym / **Zespół Badań Materiałów Roślinnych** /.

Kataliza dla potrzeb współczesnego świata

kataliza heterogeniczna selektywność ścieżka reakcji





Wszystkie procesy w otaczającym nas świecie zachodzą w indywidualnej dla siebie skali czasowej. Chociaż szybkość danego procesu wydaje się być jego ściśle zdefiniowanym parametrem, to nie jest ona jednak niezmienna. Istnieje bowiem szeroka gama substancji, które istotnie wpływają na skrócenie czasu trwania wielu reakcji chemicznych. Katalizatory, bo o nich mowa, wpływają znacząco na skrócenie czasu trwania procesów chemicznych. Zjawisko katalizy, po raz pierwszy opisane w roku 1836 przez szwedzkiego chemika Jönsa Berzeliusa, stanowi obecnie podstawę jednej z najprężniej rozwijających się dziedzin nauki. Praktyczne znaczenie katalizatorów ilustruje fakt, że około 90 procent produktów przemysłu chemicznego otrzymywanych jest na drodze procesów katalitycznych (głównie katalizy heterogenicznej). Poszukiwanie nowych katalizatorów oraz dokładny opis tych już rozpoznanych stanowi obszar działalności badawczej ogromnej rzeszy naukowców. Pracownicy Wydziału Chemii działający w **Zespołach Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego, Fizykochemii Koordynacyjnej i Bionieorganicznej, Technologii Organicznej, Chemicznych Technologii Środowiskowych** oraz **Katalizy Środowiskowej** wnoszą znaczący wkład we współczesne badania z zakresu katalizy oraz procesów towarzyszących temu zjawisku.

Zespół Technologii Organicznej

Zespół Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego

Zespół Fizykochemii Koordynacyjnej i Bionieorganicznej

Zespół Chemicznych Technologii Środowiskowych

Zespół Katalizy Środowiskowej



Grupa Chemii Powierzchni i Materiałów

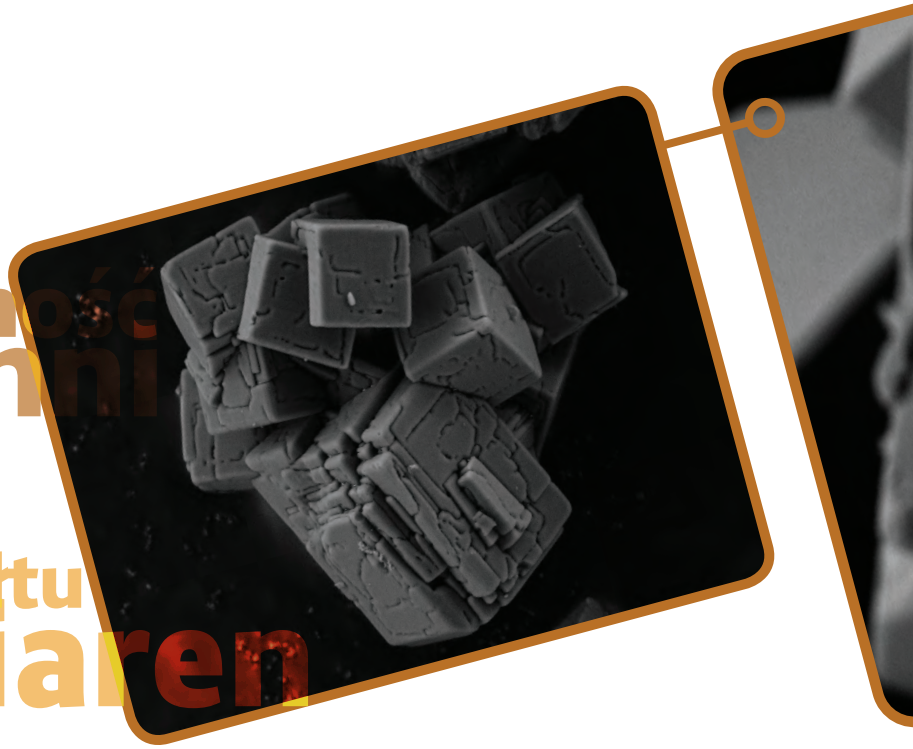
elementarne procesy powierzchniowe

Nasze badania dotyczące zjawisk i procesów zachodzących na powierzchni katalizatora koncentrują się nie tylko na zagadnieniach czysto fundamentalnych, jak poznanie właściwości elektronowych czy strukturalnych nowych materiałów, ale także na ich aplikacjach przemysłowych, środowiskowych i medycznych. Prowadzimy badania elementarnych procesów powierzchniowych w odniesieniu do środowiskowo ważnych **reakcji rozkładu tlenków azotu (deNO$_x$, deN$_2$O) oraz ich selektywnej redukcji (SCR-NOx), procesu utleniania amoniaku (NH$_3$ SCO) z silników wysokoprężnych wyposażonych w układy oczyszczania gazów spalinowych zgodnych z technologią AdBlue®**, procesów oczyszczania powietrza z lotnych związków organicznych (VOC), niskotemperaturowego selektywnego utleniania węglowodorów i tlenku węgla(II) oraz procesów dopalania sadzy. Z kolei problemy dotyczące jakości powietrza atmosferycznego oraz wód, stanowią dla nas impuls do rozwijania zrównoważonych technologii opartych na zjawiskach katalitycznych, fotokatalitycznych i adsorpcyjnych. Niewątpliwie ważnym aspektem naszej działalności naukowej są badania nad biokomponentami paliwowymi (DME, DEE) oraz pozyskiwaniem frakcji paliwowych w procesach katalitycznego przetwarzania odpadów polietylenowych.

Etapem, który limituje aktywność katalityczną materiału jest proces wiązania cząsteczki reagenta z jego powierzchnią, dlatego intencjonalna modyfikacja sposobu oddziaływania **reagent–katalizator** jest kluczem do otrzymania wysoce aktywnego i selektywnego katalizatora. Kontrola sposobu przekształcenia cząsteczki reagenta w pożądany produkt możliwa jest dzięki wyznaczeniu ilościowych zależności pomiędzy strukturą a właściwościami i reaktywnością powierzchni katalizatora. Nasze badania dotyczą zatem projektowania i syntezy nowych katalizatorów, modyfikacji już poznanych materiałów, ich dogłębnej charakterystyki i ostatecznie wyznaczania ich reaktywności. W poszukiwaniu optymalnych dla danego procesu katalizatorów badamy szeroką grupę materiałów – począwszy od nanostrukturalnych materiałów tlenkowych, dwu- i trójwymiarowych struktur zeolitowych o regulowanych właściwościach kwasowych oraz redoksowych, tlenków metali przejściowych, materiałów węglowych (grafit, grafen, nanorurki), podpórkowanych materiałów ilastych, a skończywszy na mezoporowatych sitach krzemionkowych i węglowych.

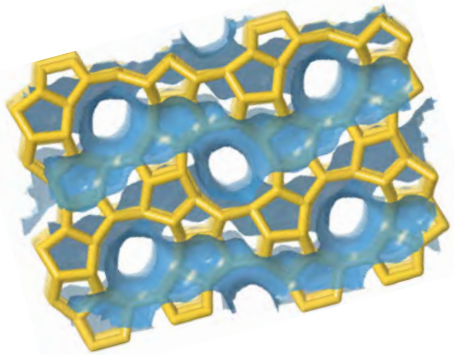
reaktywność powierzchni

inżynieria kształtu nanoziaren

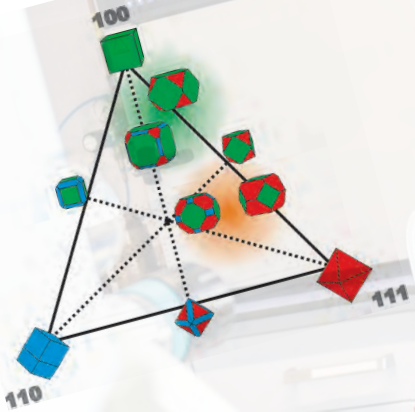


W badaniach prokatalitycznych skupiamy się głównie na optymalizacji właściwości materiałów na podstawie funkcjonalnych korelacji: **skład chemiczny – morfologia – reaktywność**. Możliwości dostrojenia właściwości katalizatora w kierunku skutecznej aktywacji cząsteczek reagentów wyżej opisanych procesów można osiągnąć poprzez modyfikację jego właściwości kwasowo-zasadowych, ingerencję w parametry elektronowe na drodze domieszkowania, funkcjonalizację powierzchni, zmiany na poziomie tekstury wywołane wprowadzeniem dodatkowej porowatości czy inżynierię kształtu nanoziaren. Przykładowo, zastępowanie kationów aktywnych redoksowo przez kationy nie posiadające takich właściwości lub wprowadzanie kationów redoksowych do nieredoksowych tlenków o określonej koordynacji pozwala na kontrolowane generowanie par redoksowych o regulowanej mocy, a więc centrów intencjonalne aktywnych katalitycznie w konkretnym procesie. Jednym z kierunków realizowanych w tym obszarze badań jest funkcjonalizacja materiałów węglowych poprzez zastosowanie niskotemperaturowej plazmy tlenowej do wprowadzania grup funkcyjnych i/lub amorfizacji powierzchni. Opracowaliśmy także nowatorskie metody wprowadzenia drugorzędowej mezoporowatości do glinokrzemianów tektonicznych i warstwowych. Możliwość kontroli, determinowanej kształtem i morfologią ziaren katalizatora, ścieżki dyfuzji reagentów w konsekwencji prowadzi do otrzymania materiałów o wysokiej dostępności tak centrów o charakterze kwasowym jak i redoksowym. Na szczególną uwagę zasługują badania i pionierskie osiągnięcia w rozwijaniu nowej klasy zeolitów warstwowych 2D. Opracowywane są także metody otrzymywania materiałów będących nośnikami reaktywnych form tlenu a także modulacji aktywności katalitycznej takich materiałów. Materiały tego typu noszą nazwę nanozymów, gdyż można je traktować jako funkcjonalne nieorganiczne mimetyki aktywności typu peroksydazy i katalazy, czyli rozkładu nadtlenku wodoru do wody i tlenu.





sita molekularne fotokatalizatory



Prowadzone badania obejmują także zjawiska fotokatalizy homogenicznej i heterogenicznej oraz katalizy enzymatycznej. **Fotokataliza** wymaga współdziałania katalizatora i absorbowanego przez ten katalizator światła. Fotokataliza i fotosensybilizacja monitorowana jest zarówno w kontekście badań podstawowych, czyli poznania mechanizmów molekularnych, jak i praktycznych zastosowań w ochronie zdrowia i środowiska naturalnego. Na bazie prostych związków koordynacyjnych oraz tlenków lub siarczków metali przejściowych syntetyzujemy fotokatalizatory do oczyszczania wody, powietrza i powierzchni, a także do produkcji tzw. paliw heligenicznych (solar fuels), do których zaliczyć można wodór powstały z rozkładu wody lub proste cząsteczki organiczne uzyskane na drodze fotokatalitycznej redukcji CO_2. Opracowujemy także fotokatalizatory umożliwiające prowadzenie syntezy organicznej. Funkcjonalność fotokatalizatorów optymalizowana jest pod kątem

uzyskania pożądanego spektralnego zakresu działania, ich właściwości utleniająco-redukujących czy adsorpcyjnych /**Grupa Fotokatalizy**/. Poprawa parametrów przekłada się bowiem na wydajność i selektywność generowania pierwotnych produktów reakcji fotokatalitycznych (np. rodników, reaktywnych form tlenu) oraz produktów końcowych (np. wodoru, związków organicznych, produktów mineralizacji). W kontekście fotokatalizy homogenicznej i mikroheterogenicznej zajmujemy się zagadnieniami aktywacji małych cząsteczek na centrach bionieorganicznych (fotosynteza, fotodegradacja biocząsteczek) oraz układach syntetycznych do zastosowań środowiskowych (fotodegradacja zanieczyszczeń chemicznych i fotoinaktywacja mikroorganizmów) i medycznych (fototerapia, fotochemioterapia) /**Zespół Fizykochemii Koordynacyjnej i Bionieorganicznej**/. Badania molekularnych mechanizmów wybranych procesów katalizy enzymatycznej prowadzone są na modelach centrów aktywnych naturalnych enzymów/metaloenzymów (np. pochodne układów tetrapirolowych w elektronowych stanach podstawowych i wzbudzonych). Celem badań jest zrozumienie mechanizmów reakcji enzymatycznych oraz fotokatalitycznych i na tej bazie otrzymywanie, charakteryzowanie i modelowanie katalizatorów, fotokatalizatorów i fotosensybilizatorów o coraz lepszych parametrach dotyczących ich efektywności i selektywności w procesach biomimetycznych i przemysłowych.

Metodologia prowadzonych przez nas badań obejmuje szerokie spektrum technik eksperymentalnych. Wśród najszerzej stosowanych wymienić należy metody spektroskopowe, takie jak spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego (CW-EPR i HYSCORE), spektroskopia oscylacyjna (FTIR i rozproszenia ramanowskiego) czy spektroskopia optyczna (UV-VIS). Na szczególną uwagę zasługuje fakt, że opracowanie przez nas czasowo-rozdzielczych **technik spektroskopowych in situ i operando** umożliwia obserwację w czasie rzeczywistym zmian zachodzących podczas oddziaływania reagent–centrum

Grupa Fotokatalizy

Zespół Fizykochemii Koordynacyjnej i Bionieorganicznej









nowe metody badawcze

aktywne, a zatem pozwala na wnioskowanie o naturze tworzącego się kompleksu, stanów przejściowych, czy krótko żyjących produktów pośrednich. Rozwijamy nowe metody i algorytmy do interpretacji wysokorozdzielczych obrazów mikroskopowych TEM/STEM, **symulacji ab initio obrazów mikroskopowych**, metod wyznaczania kształtu nanoziaren na podstawie zdjęć mikroskopowych oraz mapowania składu elementarnego z rozdzielczością chemiczną. Strukturalno-teksturalną charakterystykę materiałów opieramy na badaniach rentgenograficznych (XRD) czy pomiarach niskotemperaturowej sorpcji azotu. Co więcej, obok szeroko dostępnych metod temperaturowo-programowanych (TPD, TPR/TPO,TPSR) do badań materiałów implementujemy także opracowane przez nas metody sorpcyjne, takie jak kwazirównowagowa temperaturowo-programowana desorpcja-adsorpcja (QE-TPDA).

W badaniach potencjału katalitycznego (między innymi w procesach dehydrogenacji, całkowitego i selektywnego utleniania węglowodorów, czy produkcji paliw) wykorzystujemy układy reaktorowe pracujące w warunkach stacjonarnych i niestacjonarnych. Aktywność opracowanych przez nas katalizatorów weryfikujemy poprzez badania kinetyczne i katalityczne, również z wykorzystaniem technik izotopowych (impulsowa, cykliczna przepływowa wymiana izotopowa, SSITKA) czy elektrokatalizy. Zrozumienie mechanizmów reakcji fotokatalitycznych w układach heterogenicznych umożliwiają nam rozwijane w naszych laboratoriach nowe techniki badawcze łączące elektrochemię z fotochemią i spektroskopią, dające możliwość analizy procesów fotoindukowanego przeniesienia ładunków.

Badania wykonywane są również pod kątem aplikacji dla istniejących procesów technologicznych (np. dopalania metanu, synteza amoniaku, odwodornienie etylobenzenu) jak również poszukiwania nowych materiałów (np. materiały hybrydowe i funkcjonalne), nowych metod syntezy (np. zastosowanie plazmy niskotemperaturowej, elektroprzędzenia) i rozwiązań reaktorowych (np. nowe struktury jako wypełnienia reaktorów).

Zespół Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego II

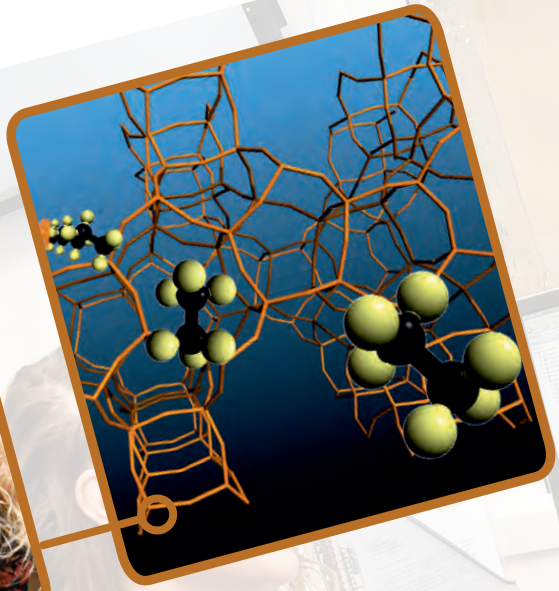
Grupa Chemii Zeolitow

Zespół Kinetyki Reakcji Heterogenicznych



zeolity 2D
modelowanie molekularne





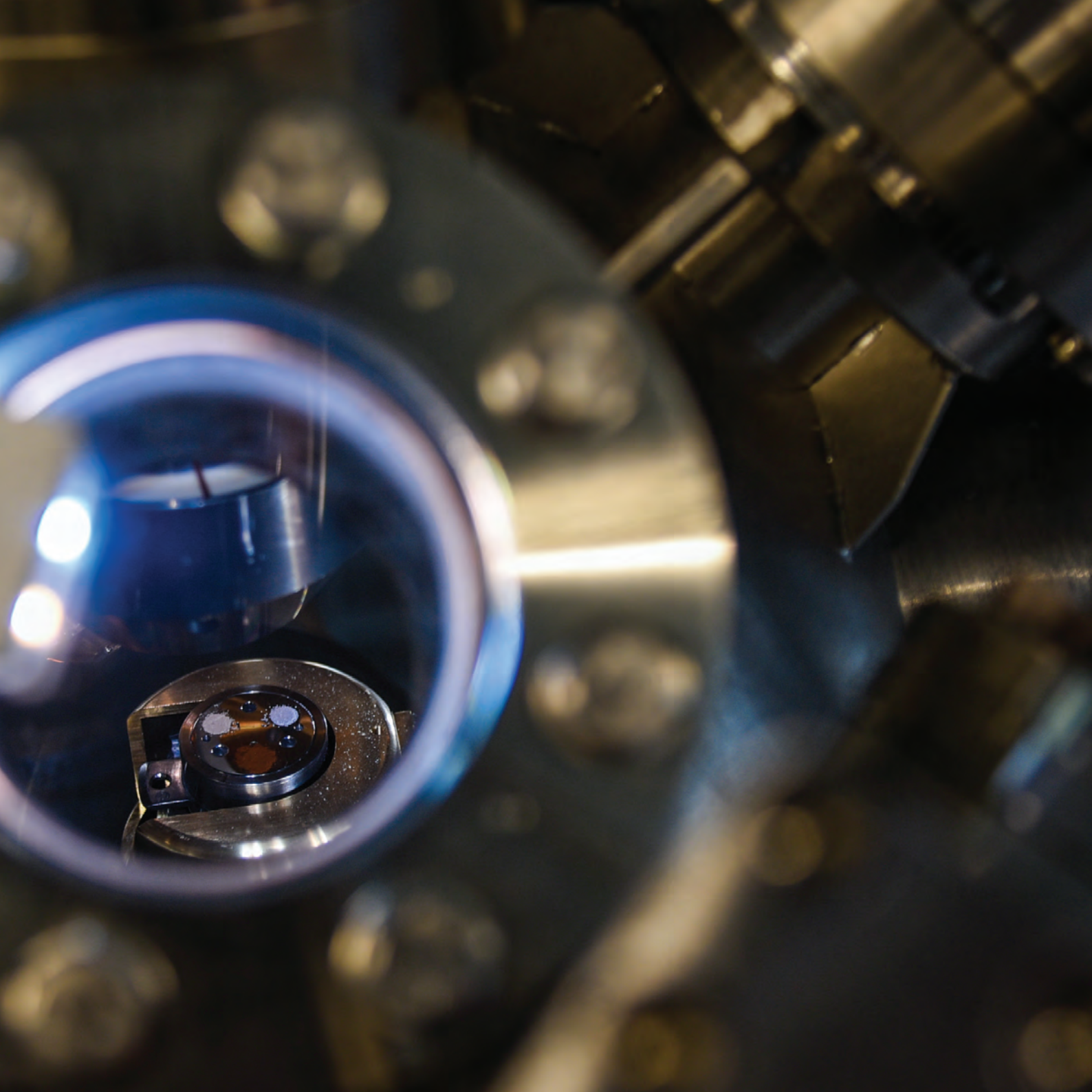


Niewątpliwym wsparciem technik eksperymentalnych są obliczenia kwantowo-chemiczne prowadzone w grupach badawczych **Zespołu Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego** oraz **Zespołu Chemii Kwantowej**. Dotyczą one molekularnego modelowania mechanizmów reakcji katalitycznych (homo- i heterogenicznych) oraz modelowania procesów katalitycznych i zjawisk powierzchniowych z wykorzystaniem metod termodynamiki i kinetyki ab initio. W skutecznym przewidywaniu reaktywności i właściwości fizykochemicznych układów katalitycznych pomocne są nowoopracowane metody i algorytmy do interpretacji wysokorozdzielczych obrazów mikroskopowych TEM/STEM, modelowanie molekularne struktury, energetyki, właściwości i reaktywności katalizatorów, modelowanie zjawisk powierzchniowych, charakterystyka struktury elektronowej i geometrycznej centrów/form aktywnych układów katalitycznych.

Zespół Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego

Zespół Chemii Kwantowej

Istotną misją zespołów zaangażowanych w prace badawcze z obszaru katalizy jest kształcenie studentów poprzez aktywne włączanie ich w zaawansowane badania naukowe dotyczące zjawiska katalizy i chemii materiałów z wykorzystaniem szerokiego wachlarza nowoczesnych technik eksperymentalnych. Badanie te prowadzone są w ścisłej kooperacji z wiodącymi na świecie uniwersytetami i ośrodkami badawczymi oraz partnerami przemysłowymi.



Nowoczesna analityka chemiczna

monitoring środowiska

jakość wód i gleb



skład pierwiastkowy

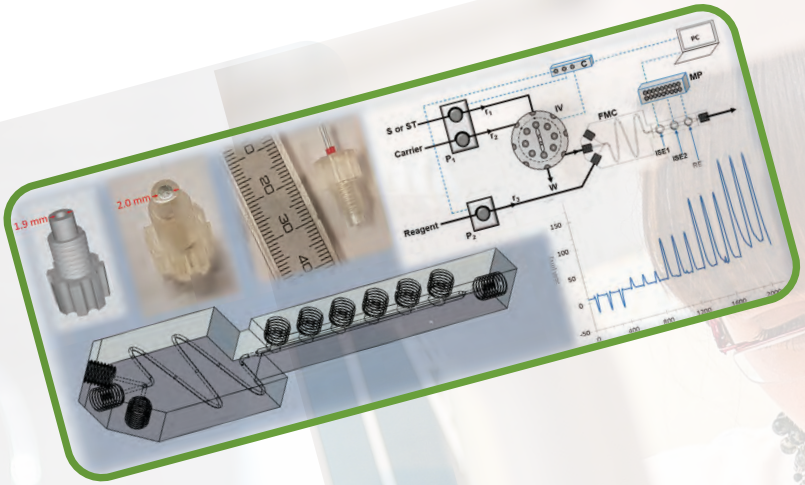
techniki instrumentalne

Czy można wyobrazić sobie funkcjonowanie współczesnej nauki czy techniki bez znajomości składu chemicznego obiektów materialnych? Uzyskanie informacji o składzie pierwiastkowym jest niezbędne w niemalże każdej dziedzinie działalności człowieka: poczynając od charakterystyki surowców i produktów procesów przemysłowych, poprzez badania składników środowiska naturalnego a kończąc na projektowaniu leków, kryminalistyce czy sztuce. Tradycyjnie określaniem składu pierwiastkowego materiałów zajmowała się chemia analityczna.

Dynamiczny rozwój nauk przyrodniczych i technicznych, który miał miejsce w XX wieku, całkowicie przedefiniował rozumienie pojęcia chemii analitycznej. W odpowiedzi na wymagania coraz staranniejszej kontroli stawiane przez nanotechnologię i przemysł powstały nowe techniki analityczne a tradycyjnie stosowane metody chemiczne i fizykochemiczne uzupełnione zostały metodami fizycznymi i biologicznymi.

W nowoczesnym ujęciu analityka chemiczna nie tylko pozwala wyznaczać z pożądaną dokładnością i precyzją skład jakościowy i/lub ilościowy badanych obiektów, ale także służy odpowiedzią na pytania *„w jakiej postaci?”*, *„gdzie?”*, *„w jakim czasie?”* czy *„w jakiej fazie?”*.

Naukowcy naszego Wydziału działający w **Zespołach Analiz Środowiskowych i Biomedycznych** oraz **Fizykochemicznych Badań Środowiskowych** wychodzą naprzeciw kolejnym wyzwaniom stawianym przed współczesną chemią analityczną. Wspomniane wyzwania dotyczą przede wszystkim technik instrumentalnych, wśród których najważniejszymi są dla nas



mikropróbkowanie laserowe

techniki spektrometrii atomowej, elektroanalityczne oraz przepływowe. Bez wątpienia należą one do najbardziej rozpowszechnionych technik analitycznych, nie tylko w laboratoriach badawczych, ale także w laboratoriach prowadzących pomiary rutynowe. Naszym priorytetem jest przede wszystkim opracowywanie nowych metod i procedur analizy jakościowej i ilościowej próbek istotnych z punktu widzenia współczesnej medycyny i toksykologii. Z kolei, nasze badania z zakresu monitoringu środowiska koncentrują się głównie na systematycznej analizie jakości wód, gleb oraz roślin i szczególnie dotyczą oznaczania specjacji i biodostępności metali ciężkich i niemetali oraz oznaczania pozostałości leków w środowisku.

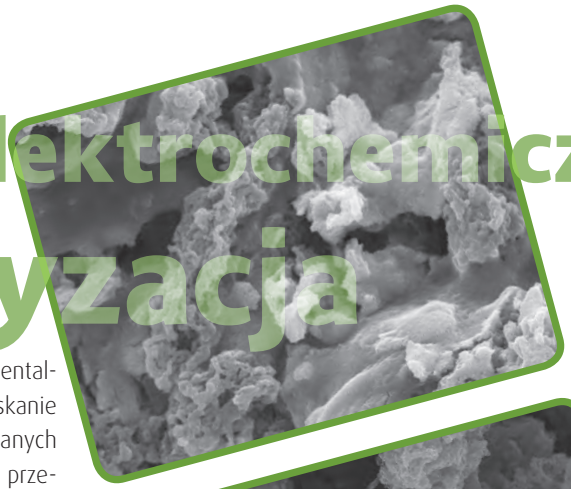
Niemalże wszystkie stosowane obecnie procedury analityczne, obok samego procesu pomiarowego, wymagają przeprowadzenia **etapu wstępnego przygotowania próbki do analizy**, a także zastosowania odpowiednich **procedur kalibracyjnych** umożliwiających przetworzenie zmierzonego sygnału analitycznego na stężenie oznaczanego składnika (analitu).

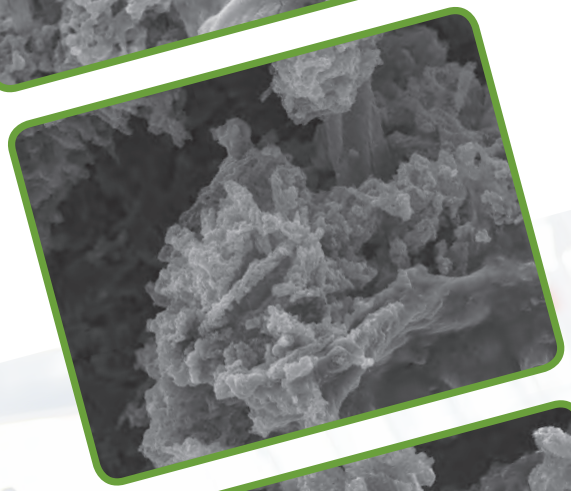
Mając na uwadze jak najlepsze przygotowanie próbki do analizy uzyskaliśmy wiele nowych materiałów sorpcyjnych: modyfikowanych zeolitów/żeli krzemionkowych, materiałów hybrydowych, polimerów dopasowanych jonowo, czy popularnych w ostatnim czasie nanorurek węglowych, jak i opracowaliśmy procedury selektywnego zatężania analitów /**Pracownia Analitycznej Spektrometrii Atomowej**/.

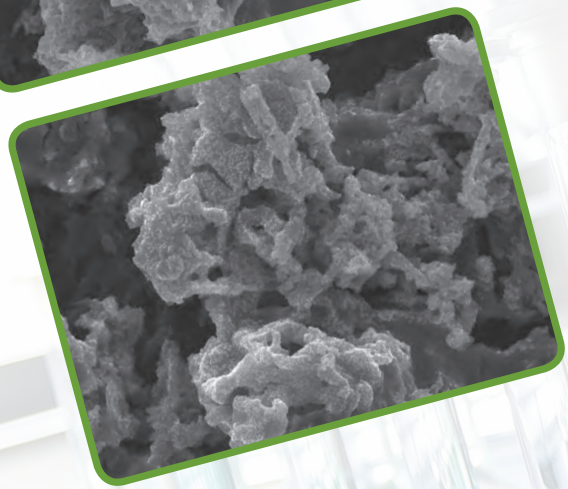
Zespół Analiz Środowiskowych i Biomedycznych

Zespół Fizykochemicznych Badań Środowiskowych

bioczujniki elektrochemiczne
miniaturyzacja







Ponadto, wprowadzenie nowatorskich rozwiązań instrumentalnych do różnych technik przepływowych umożliwiło uzyskanie oryginalnych modułów służących do przygotowania badanych próbek do analizy w trybie *on-line*, integrację systemów przepływowych z nowoopracowywanymi **czujnikami i bioczujnikami elektrochemicznymi**, jak i ich miniaturyzację. Co więcej, projektowane przez nas metody analityczne opieramy na innowacyjnych rozwiązaniach kalibracyjnych umożliwiających diagnozę i eliminację błędów systematycznych spowodowanych efektami matrycowymi.

W badaniach prowadzonych w ramach **Pracowni Analitycznej Spektrometrii Atomowej** wykorzystujemy szeroki wachlarz technik spektrometrii atomowej. Pracujemy również nad bezpośrednią analizą ciał stałych z wykorzystaniem mikropróbkowania laserowego. Połączenie tej techniki próbkowania z czułym instrumentem jakim jest spektrometr mas z jonizacją w plazmie sprzężonej indukcyjnie (ICP-MS) pozwala na bezpośrednią, analizę ciał stałych, bądź tworzenie map rozmieszczenia pierwiastków na zadanym obszarze próbki. W analizie pierwiastkowej poszukujemy narzędzi umożliwiających nie tylko wyznaczenie całkowitej zawartości czy średniego stężenia danego pierwiastka, ale także identyfikację i oznaczenie jego poszczególnych form. Do tego celu wykorzystujemy sprzężone z rożnymi technikami spektrometrii atomowej: chromatografię cieczową (HPLC-ICP-MS) oraz techniki ekstrakcyjne, takie jak mikroekstrakcja do kropli łatwo krzepnącego rozpuszczalnika lub ekstrakcja do fazy stałej. W **Zespole Analiz Środowiskowych i Biomedycznych** prowadzimy także badania dotyczące opracowania nowych jedno- i wieloskładnikowych metod analitycznych z wykorzystaniem technik

ekspertyzy toksykologiczno -sądowe



przepływowych do celów analizy środowiskowej czy przemysłowej. W badaniach tych wykorzystujemy zarówno dostępne handlowo, zautomatyzowane analizatory, jak i opracowane przez nas oryginalne, zintegrowane systemy analityczne. Nowy kierunek naszych prac badawczych stanowią także mikroprzepływowe **urządzenia analityczno-diagnostyczne** tworzone z zastosowaniem druku 3D lub z wykorzystaniem papieru jako materiału bazowego (μPADs).

W **Zespole Analiz Sądowych i Klinicznych** rozwijane są nowe metody analityczne bazujące na technice elektroforezy kapilarnej a dedykowane do selektywnego rozdziału związków o wysokim stopniu podobieństwa strukturalnego oraz separacji złożonych mieszanin substancji różniących się ładunkiem oraz hydrofobowością. Jednym z naszych głównych osiągnięć na tym polu jest opracowanie prototypowego, bezpośredniego połączenia pomiędzy aparatem do elektroforezy kapilarnej a aparatem do mikroskalowej termoforezy (CE-MST), dzięki któremu możliwe jest prowadzenie analiz różnorodnych procesów molekularnych, np. monitorowania oddziaływań międzycząsteczkowych.

Nowoopracowane metody ostatecznie znajdują zastosowanie w analizie próbek rzeczywistych, takich jak pestycydy, żywność (wina, napoje izotoniczne), nasiona i susz roślinny, a także materiały kryjące (atramenty drukarkowe) i kosmetyki. W badaniach nad przygotowaniem materiału biologicznego – głównie sekcyjnego, na potrzeby ekspertyz toksykologiczno-sądowych, wykorzystujemy nowoczesne techniki mikroekstrakcji oraz ultraczułe metody chromatograficzne zapewniające wysoką wydajność izolacji badanych ksenobiotyków.

Zespół Analiz Środowiskowych i Biomedycznych

Pracownia Analitycznej Spektrometrii Atomowej

Zespół Analiz Sądowych i Klinicznych

W. Helbig zdefiniował chemię sądową jako **zastosowanie wiedzy i procedur chemicznych w celu wymierzania sprawiedliwości**. We współczesnej kryminalistyce, wśród wielu zadań stawianych chemikom-analitykom do najważniejszych należą analiza i identyfikacja różnorakich śladów znalezionych na miejscu przestępstwa oraz zabezpieczonych materiałów dowodowych. W **Pracowni Chemii Sądowej** prowadzone są prace z zakresu rozwijania nowych technik przygotowania materiału biologicznego (SPME, MEPS, MAE) oraz analizy jakościowej i ilościowej związków istotnych z toksykologicznego punktu widzenia. Ponadto prowadzone są również prace podstawowe związane z doskonaleniem i poszukiwaniem nowych zastosowań technik elektromigracyjnych. Nasze badania dotyczą również analiz identyfikacyjnych i dyskryminacyjnych mikrośladów (szminek i lakierów do paznokci o zbliżonym odcieniu) oraz dokumentów (m.in. dowodów, paszportów, banknotów).

biosfera
metale ciężkie

Techniki wykorzystywane w tym celu sklasyfikować można jako: nieniszczące (ATR-FTIR), częściowo niszczące (LIBS) oraz elektromigracyjne (MEKC, NACE, MEEKC) z dającymi różne możliwości systemami detekcji (PDA, LIF, MS) i wysokosprawnymi technikami chromatograficznymi (GC-MS, LC-MS).

Opracowujemy także efektywne procedury analityczne do oznaczania pestycydów w różnych matrycach czy oceny skażenia roślinnych produktów żywności i suplementów żywności metalami toksycznymi / **Zespół Analiz Toksykologicznych i Farmaceutycznych**/. Współczesna analiza chemiczna wymaga nie tylko opracowywania odpowiednio efektywnych i selektywnych metod oznaczania analitów, ale także przestrzegania reguł tzw. chemii zielonej, której istotą jest minimalizowanie zużycia odczynników chemicznych, a zwłaszcza toksycznych rozpuszczalników organicznych.

Niewątpliwie rozwój przemysłu, transportu i rolnictwa wpływa pozytywnie na jakość życia we współczesnym świecie. Jednak trafne rozstrzygnięcie czy owa jakość jest dobra czy niewystarczająca wymaga uwzględnienia także czynników środowiskowych. Stan środowiska rzutuje na jakość życia zarówno w sposób bezpośredni (poprzez wpływ na zdrowie), jak i pośredni (poprzez świadczenie usług dla gospodarki). Wysoka zawartość metali ciężkich lub trwałych związków organicznych (TZO) w biosferze wpływa destrukcyjnie na różnorakie ekosystemy.

Pracownia Chemii Sądowej

Zespół Fizykochemicznych Badań Środowiskowych

Zespół Analiz Toksykologicznych i Farmaceutycznych







błony biologiczne



Wody gruntowe

Problem ten szczególnie uwidoczniony jest na obszarach wysoko zurbanizowanych, gdzie występuje wiele mobilnych i stacjonarnych źródeł ich emisji. Szczególnie niebezpiecznym jest zanieczyszczenie litosfery metalami ciężkimi /**Zespół Fizykochemicznych Badań Środowiskowych**/. Metale te odkładają się w glebie, łatwo ulegając migracji do wód gruntowych. W tym świetle nasze badania z zakresu monitoringu środowiska skierowaliśmy na analizę jakości wód oraz gleb terenu Małopolski. W obszarze związanym z badaniem gleb specjalizujemy się również w analizie aktywności ureazy glebowej jako czynnika kluczowego w cyklu obiegu azotu w przyrodzie. Trwałe związki organiczne stanowią z kolei poważne zagrożenie dla biocenoz destruentów glebowych. Związki te, wykazując znaczne powinowactwo do tłuszczów, łatwo wnikają do błon komórkowych komórek destruentów i akumulują się w nich zmieniając ich strukturę i funkcjonowanie. W oparciu o technikę monowarstw Langmuira, prowadzimy szczegółowe badania nad modelowaniem wpływu zanieczyszczeń środowiska na błony biologiczne. Strukturę monowarstw obrazujemy za pomocą mikroskopii kąta Brewstera, dokładne upakowanie cząsteczek w warstwie określamy stosując promieniowanie rentgenowskie (metoda synchrotronowa GIXD) a przebieg reakcji enzymatycznej wyznaczamy stosując promieniowanie podczerwone (metoda spektroskopowa PMIRRAS). Uważamy bowiem, iż zgromadzona przez nas wiedza pozwoli na skuteczniejsze usuwanie TZO ze środowiska, na przykład poprzez wprowadzanie do gleb odpowiednich mikroorganizmów zdolnych do ich degradacji.

Nietrudno jest zauważyć, jak wiele pytań o dopuszczalne poziomy zanieczyszczeń w lekach, wodzie, materiałach technologicznych czy żywności stawianych jest przed badaczami każdego dnia. Misją Pracowników naszego wydziału jest więc tworzenie i doskonalenie narzędzi, umożliwiających efektywniejsze i dokładniejsze poznanie otaczającego świata, poprzez próbę odpowiedzi na pytania o skład pierwiastkowy badanych obiektów. Co więcej, mając na uwadze **interdyscyplinarny wymiar**, współczesnych zadań analitycznych stawiamy sobie za cel pogłębianie współpracy ze specjalistami innych dziedzin: fizykami, biologami, antropologami, toksykologami oraz lekarzami.



Zespół Fizykochemicznych Badań Środowiskowych



zanieczyszczenie środowiska


L34 8. 10. 2018 NORMAL

Zaawansowane materiały i nanotechnologie

Zespół Chemii Koordynacyjnej

Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych

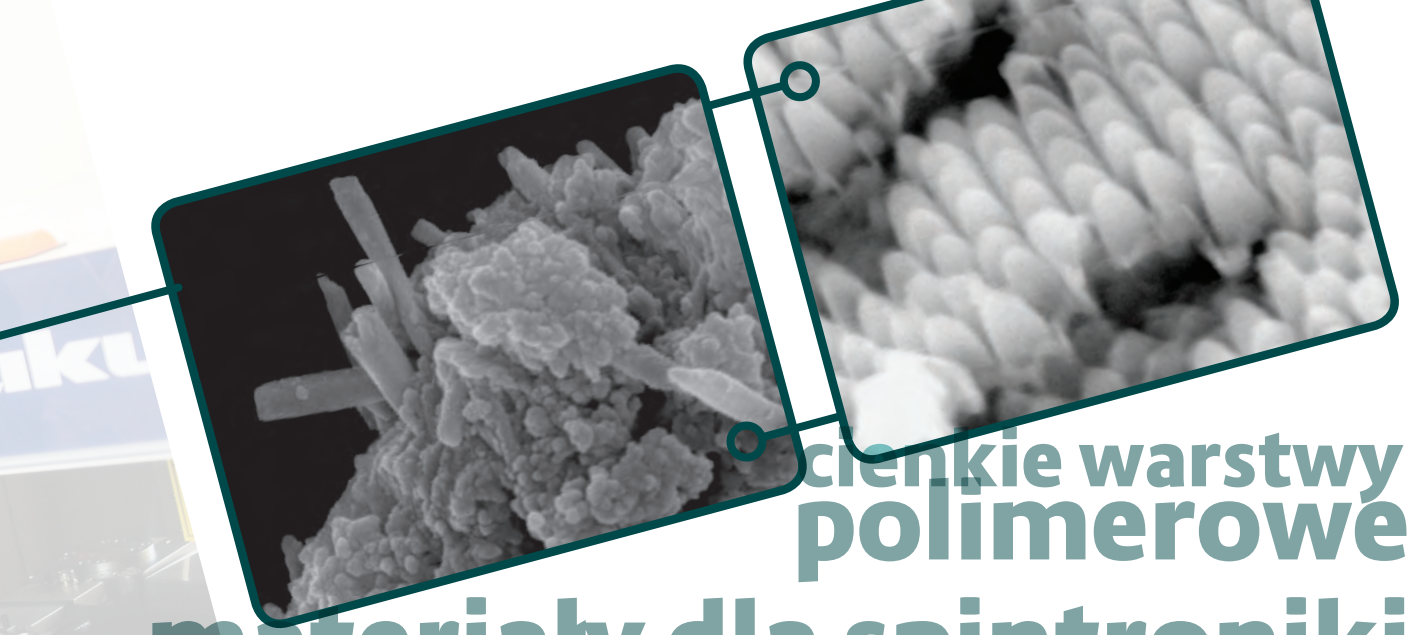


nanomagnesy nanostruktury

Czy Richard Feynman, gdy w 1959 roku zatytułował swój wykład *Tam, na dole jest jeszcze sporo miejsca*, wiedział o tym, że właśnie zapoczątkował erę nanotechnologii? Niezwykłej dziedziny nauki zajmującej się nanocząstkami, czyli obiektami o wielkości 10–200 nm, które swoje zdumiewające właściwości zawdzięczają rozmiarom niemal tysiąckrotnie mniejszym niż średnica ludzkiego włosa? Feynman rozważał następstwa intencjonalnej zdolności manipulowania materią w skali atomowej. My z kolei, żyjąc w okresie wielkiego i dynamicznego rozwoju nanotechnologii, wiemy już, że możliwa jest kontrola struktury i właściwości już na poziomie pojedynczej cząsteczki.

Projektowanie zaawansowanych materiałów molekularnych nie jest obce badaczom z naszego wydziału. Wykorzystując możliwości, jakie oferuje chemia związków koordynacyjnych, supramolekularnych i metaloorganicznych, syntetyzujemy krystaliczne układy molekularne o pożądanych właściwościach fizykochemicznych. Prowadzone przez nas poszukiwania korelacji pomiędzy strukturą a reaktywnością skutkują otrzymywaniem porowatych polimerów koordynacyjnych reagujących na bodźce zewnętrzne, nanostrukturalnych materiałów protono-przewodzących, a także materiałów służących do budowy chemosensorów z odpowiedzią elektryczną, magnetyczną i luminescencyjną. /**Zespół Chemii Koordynacyjnej, Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych**/. Projektujemy, syntetyzujemy i charakteryzujemy nowe funkcjonalne materiały zmieniające swoje właściwości fizyczne pod wpływem zewnętrznych czynników, takich jak światło, ciśnienie czy temperatura /**Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych**/. Nasze prace prowadzone są zatem w kierunku otrzymania nanostruktur, które mogą być traktowane jako potencjalne nośniki danych, sensory czy przełączniki molekularne.

Z kolei nanomagnesy kwantowe – układy molekularne oparte na kompleksach metali przejściowych o nietypowych liczbach koordynacyjnych i z nietypowymi ligandami, potencjalnie mogą stanowić elementy stosowane w konstrukcji komputerów kwantowych (spintronika). W naszych laboratoriach otrzymujemy także jonowe związki koordynacyjne o dużym niepo-



cienkie warstwy polimerowe materiały dla spintroniki

rządku dynamicznym oraz substancje ciekłokrystaliczne, które następnie badamy pod kątem właściwości termicznych powiązanych z reorientacją molekularną i zmianami strukturalnymi. Z punktu widzenia aplikacyjnego związki te są potencjalnymi materiałami do konstrukcji akumulatorów energii termicznej /**Zespół Badań Przemian Fazowych**/. Materiały o dedykowanych właściwościach ciekłokrystalicznych projektowane są także w celu zastosowania ich jako organicznych półprzewodników na podłożach elastycznych /**Zespół Fizykochemii Organicznej**/. Sięgamy również po możliwości jakie oferuje chemia układów polimerowych /**Zespół Nanotechnologii Polimerów i Biomateriałów**/. Otrzymujemy cienkie warstwy polimerowe oraz polimerowe układy koloidalne wykazujące właściwości przewodzące i fotoaktywne (szczotki polimerowe szczepione na powierzchni do zastosowań fotowoltaicznych i sensorowych), mikroreaktory chemiczne, wielowarstwowe mikrokapsuły polimerowe i hybrydowe oraz mezoporowate nanocząstki krzemionkowe pełniące funkcje mikroreaktorów fotochemicznych. Tworzymy hybrydowe fotokatalizatory do degradacji zanieczyszczeń wody w warunkach środowiskowych.

Zespół Badań Przemian Fazowych

Zespół Fizykochemii Organicznej

Zespół Nanotechnologii Polimerów i Biomateriałów

Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej zajmuje się otrzymywaniem funkcjonalnych materiałów wieloskładnikowych w oparciu o nowoczesne techniki inżynierii krystalicznej *in silico*. Stosujemy metody krystalografii kwantowej, takie jak eksperymentalnie wyznaczaną gęstość elektronową dla faz krystalicznych. Dzięki analizie topologicznej tego rozkładu możemy kontrolować procesy samoorganizacji cząsteczek w struktury o istotnych właściwościach fizycznych i w biomateriały.



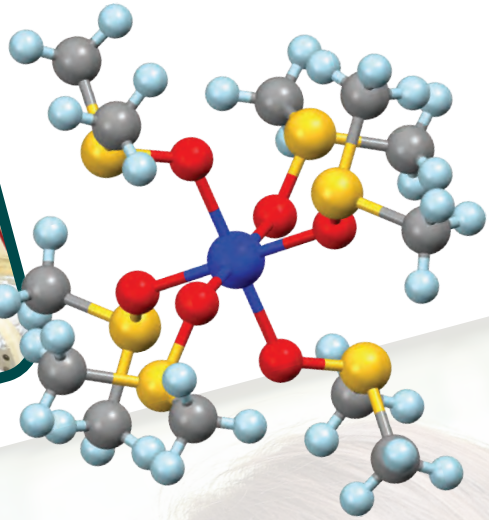
ogniwa paliwowe

Innowacyjne technologie są również wykorzystywane we współczesnej elektrochemii, co daje możliwości wytwarzania elektrod o sprecyzowanej morfologii, a więc i nowych właściwościach /**Zespół Elektrochemii**/. Bogactwo materiałów, które mogą być wykorzystane do syntezy elektrod, powoduje że obecnie coraz częściej mówi się o projektowaniu materiałów elektrodowych o określonych właściwościach oraz przeznaczonych do konkretnych zastosowań. Prowadzimy intensywne badania z zakresu elektrochemicznych metod wytwarzania oraz kompleksowej charakterystyki materiałów nanostrukturalnych, takich jak dwu- i trójwymiarowe tlenki metali oraz uporządkowane struktury nanodrutów metalicznych, półprzewodnikowych i polimerowych. Ten obszar naszej aktywności skupia się na pozyskaniu materiałów mogących znaleźć zastosowanie w układach do generowania i magazynowania energii, w fotoelektrochemii, jako sensory foto- i elektrochemiczne, aż do zastosowań biomedycznych.

Zespół Elektrochemii

Zespół Nanotechnologii Polimerów i Biomateriałów





nośniki leków

Tworzymy i testujemy różnego rodzaju nanostrukturalne sensory chemiczne, między innymi do oznaczania nadtlenku wodoru, glukozy czy chloroformu. Konstruujemy także fotoelektrochemiczne ogniwa paliwowe oraz nowe układy bioelektrochemiczne oparte na przyjaznych środowisku mikroorganizmach. Skupiamy się także na syntezie wielofunkcyjnych nanostrukturalnych biomateriałów do zastosowań w implantologii, a także jako nośniki leków.

Podstawowe zadanie nanotechnologii, którym jest wykorzystanie unikatowych cech materiału poprzez celową kontrolę jego właściwości na poziomie atomowym czy molekularnym, realizujemy także w pracach prowadzonych na pograniczu nauk biologicznych i chemicznych / **Zespół Nanotechnologii Polimerów i Biomateriałów** /. Tworzone przez nas miniaturowe struktury już dziś są wykorzystywane do otrzymywania podłoży polimerowych do hodowli komórek, oceny cytotoksyczności czy doskonalenia sposobów leczenia wielu chorób. Projektujemy właściwości nanostrukturalnych, funkcjonalnych materiałów polimerowych i hybrydowych w celu otrzymania nowych polimerowych leków antywirusowych, szczególnie skierowanych przeciwko wirusowi HSV-1 (rodzina Herpesviridae) oraz Zika (rodzina Flaviviridae).

superparamagnetyczne nanocząstki



Otrzymujemy związki w formie biodegradowalnych nanokapsuł polimerowych, które pełnią rolę „magazynu" dla różnych substancji (leków, witamin, aromatów, substancji nawilżających). W projektowaniu biodegradowalnych nośników leków wykorzystujemy rozpuszczalne w wodzie polimery: amfifilowe polielektrolity, jonowe polimery przewodzące i naturalne biopolimery. Syntetyzujemy układy polimerowe wpływające na krzepliwość krwi, a więc pełniące rolę antykoagulantów i ich inhibitorów. Wychodząc naprzeciw wyzwaniom terapii celowanych, prowadzimy badania nad biokoniugatami do celowanej terapii fotodynamicznej. Wykorzystując superparamagnetyczne nanocząstki tlenku żelaza (SPION) modyfikowane powierzchniowo warstwami polimerowymi oraz przeciwciałami, otrzymujemy celowane kontrasty do obrazowania z wykorzystaniem rezonansu magnetycznego, a także układy teranostyczne. Zainteresowanie budzi wykorzystanie nanotechnologii w inżynierii tkankowej i implantologii; także w tym obszarze prowadzimy intensywne badania nad formułowaniem biomateriałów do rusztowań komórkowych, opartych na połączeniu polimerów naturalnych, nanoglinek i związków bioaktywnych w procesie biomineralizacji kości. Tak przygotowywane rusztowania odwzorowują budowę, skład chemiczny i cechy strukturalne naturalnej tkanki kostnej, a jednocześnie charakteryzują się osteoinduktywnością i zdolnościami terapeutycznymi.





nanokapsuły rusztowania komórkowe

warstwy zeolitowe





Na szczególną uwagę zasługują badania nad syntezą i funkcjonalizacją materiałów krzemionkowych i glinokrzemianowych o dużej powierzchni i jednolitej strukturze porowatej / **Zespół Chemicznych Technologii Środowiskowych** /, układów tlenkowych (litych, nośnikowych i kompozytowych) / **Zespół Katalizy Środowiskowej** / jak i pionierskie osiągnięcia w rozwijaniu nowej klasy zeolitów warstwowych 2D / **Grupa Chemii Zeolitów** /. Obejmują one odkrycia nowych form zeolitów warstwowych UJM-1 i UJM-2 (Uniwersytet Jagielloński Material numer 1 i 2), opracowanie metod manipulacji warstw w celu otrzymywania nowych struktur. A ostatnio, odkrycie długo poszukiwanej metody syntezy koloidalnych zawiesin warstw zeolitowych, która umożliwia syntezę wartościowych materiałów i kompozytów *by design*. Proponujemy oryginalne ścieżki syntezy nanoreplik węglowych poprzez depozycję prekursorów polimerowych w porach szablonów krzemionkowych, projektujemy układy typu rdzeń–powłoka (core–shell) do bimodalnej pracy w aplikacjach adsorpcyjno-katalitycznych /**Zespół Technologii Organicznej**/.



funkcjonalizacja Li-Ion

Opracowujemy także nowe technologie wytwarzania i modyfikacji zaawansowanych materiałów funkcjonalnych znajdujących zastosowanie w systemach magazynowania i przetwarzania energii / **Zespół Technologii Materiałów i Nanomateriałów**/. W szczególności specjalizujemy się w syntezie funkcjonalnych materiałów elektrodowych (niezawierających kobaltu), nanokompozytów i elektrolitów dla akumulatorów litowych (Li-Ion) do magazynowania energii w systemach stacjonarnych (OZE, Smart Grid) oraz w transporcie bezemisyjnym (EV, eBUS). Opracowywane technologie materiałowe i procesy technologiczne są projektowane zgodnie z zasadami „zielonej chemii", w tym z uwzględnieniem wykorzystania surowców odnawialnych dla obniżenia śladu węglowego, strategicznego dostępu do surowców (GOZ) oraz ekonomicznego zastosowania w wielkoskalowych produkcjach przemysłowych. Wszystkie projektowane systemy uwzględniają łatwość ich recyklingu oraz niską energochłonność.

Osiągnięcie celów stawianych przed współczesną nanotechnologią wymaga wsparcia ze strony zaawansowanych metod badawczych. Mikroskopia sił atomowych (AFM) jest podstawową techniką wykorzystywaną w nanotechnologii miękkiej materii. Wykorzystując technikę rentgenowskiej spektroskopii fotoelektronowej (XPS), przeznaczoną do badania składu chemicznego powierzchni materiałów stałych, uzyskujemy wiele wartościowych informacji na temat budowy warstw powierzchniowych i struktur cienkowarstwowych / **Zespół Technologii Organicznej** /. Inżynieria krystaliczna oraz rentgenowska analiza strukturalna monokryształów stanowi użyteczne narzędzie w badaniach strukturalnych aspektów właściwości fizycznych i biologicznych.

Zespół Chemicznych Technologii Środowiskowych

Grupa Chemii Zeolitów

Zespół Technologii Organicznej

Zespół Katalizy Środowiskowej

Zespół Technologii Materiałów i Nanomateriałów

rentgenowska analiza strukturalna

geometria molekularna

Badamy korelację struktury krystalicznej z liniowymi właściwościami optycznymi (np. dwójłomność liniowa, dwójłomność kołowa) oraz nieliniowymi właściwościami optycznymi czy też poszukujemy zależności pomiędzy aktywnością biologiczną związków o potencjalnych właściwościach farmakologicznych (np. leki adrenergiczne, przeciwarytmiczne, przeciwmalaryczne) a ich przestrzenną geometrią molekularną, zajmujemy się strukturalną charakterystyką materiałów biozgodnych /**Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej**/. Z kolei badania metodą dyfrakcji proszkowej dają wynik bezpośrednio zależny od struktury krystalicznej związku, dzięki czemu można tą techniką rozróżnić odmienne formy polimorficzne związków, nieodróżnialne innymi metodami. Metoda ta doskonale nadaje się do badania obiektów wartościowych lub delikatnych /**Zespół Strukturalnej Dyfraktometrii Proszkowej**/. We wskazaniu na komponenty istotne z punktu widzenia funkcjonalności nanomateriałów pomocne są badania metodą spektroskopii ramanowskiej /**Zespół Spektroskopii Oscylacyjnej**/ czy spektroskopii w podczerwieni /**Grupa Chemii Zeolitów**/ obejmujące szeroki wachlarz tematów, m.in. badania materiałów funkcjonalnych, nowych materiałów syntetycznych oraz związków biologicznych. Do badań wykorzystywanych jest również wiele komplementarnych metod fizykochemicznych.

W aspekcie badań podstawowych i aplikacyjnych współpracujemy z działami badań i rozwoju firm z różnych gałęzi przemysłu oraz innymi jednostkami badawczymi uczelni i jednostek PAN.

Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Zespół Spektroskopii Oscylacyjnej

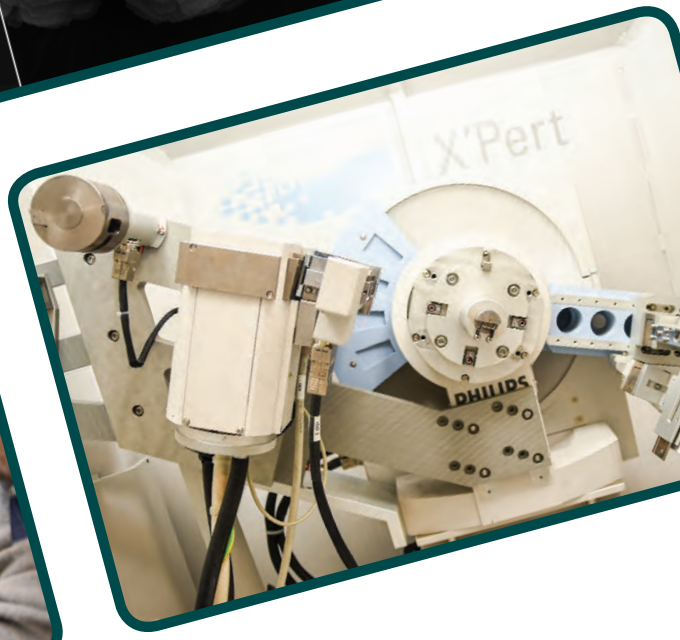
Zespół Strukturalnej Dyfraktometrii Proszkowej

Grupa Chemii Zeolitów

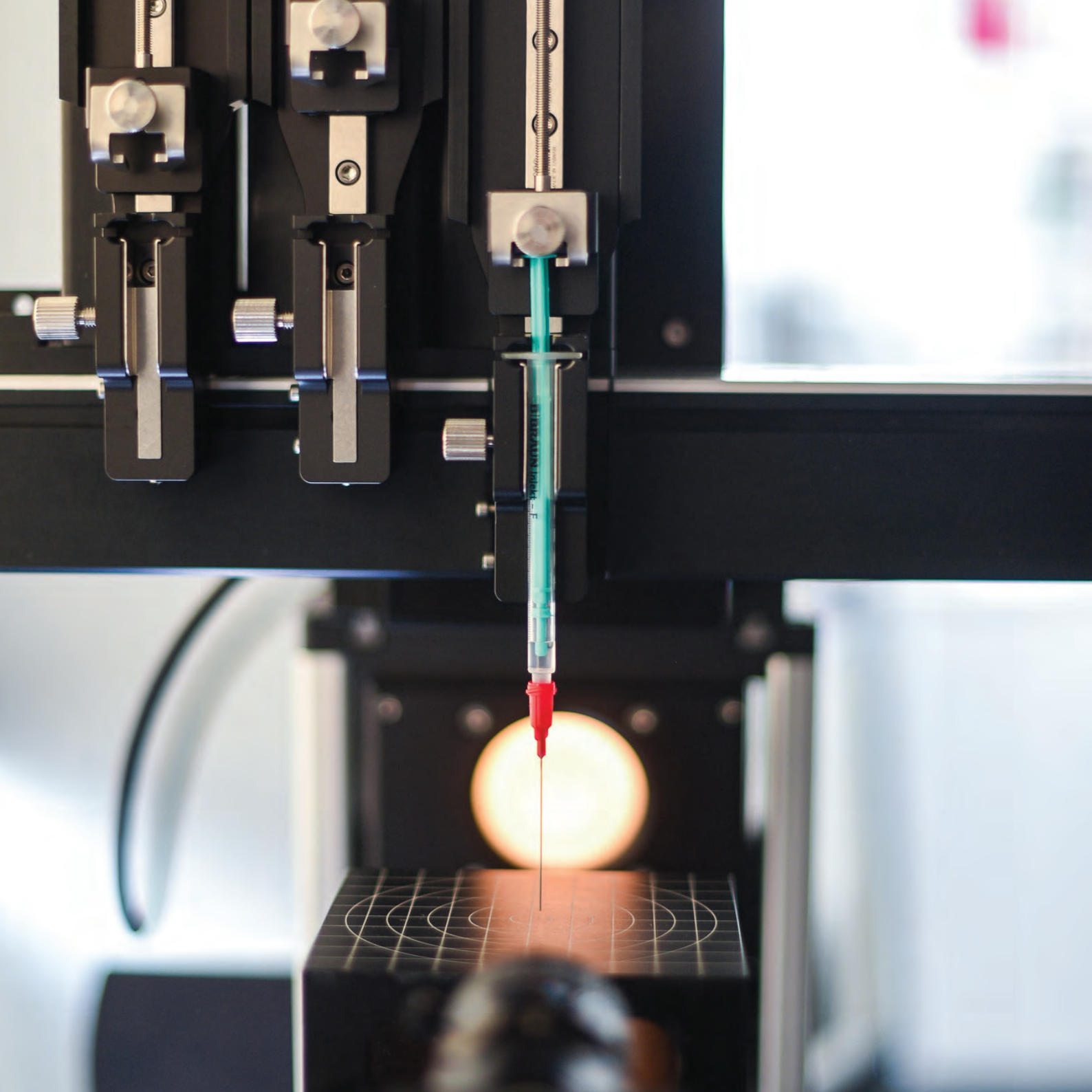
materiały biozgodne







nanotechnologia materii miękkiej



Nowoczesna synteza i fizykochemia organiczna

iminocukry

kataliza asymetryczna

Zespół Stereokontrolowanej Syntezy Organicznej

Zespół Chemii Związków Heterocyklicznych i Metaloorganicznych

Widziałem, jak dwa małe atomy łączyły się w parę, jak większy objął dwa mniejsze [...]*, zobaczyłem, jak utworzyły łańcuch [...] Spędziłem część nocy kreśląc na papierze szkice tych sennych widziadeł* (August Kekule, 1890). Atomy węgla mogą łączyć się ze sobą w sposób niemożliwy dla innego pierwiastka. Zdolność ta skutkuje tworzeniem nowych związków o charakterystycznych dla siebie właściwościach fizykochemicznych. Nic więc dziwnego, że badanie związków węgla, których liczba osiągnęła już ponad 10 milionów, stanowi odrębną gałąź działalności chemików. Otrzymywanie nowych związków organicznych (synteza) jest integralną częścią chemii organicznej, wymagającą od chemika w równym stopniu wiedzy i wyobraźni.

Biegłości oraz kreatywności w projektowaniu metod syntezy nowoczesnych związków organicznych nie brakuje także naukowcom z naszego wydziału. Wiodącym kierunkiem naszych badań jest projektowanie oraz synteza nowych leków, między innymi o działaniu przeciwnowotworowym. Koncentrujemy się także na aspektach syntezy asymetrycznej czy funkcjonalizacji olefin na drodze jednoelektronowego utlenienia i redukcji czy zastosowaniu reakcji pericyklicznych do otrzymywania złożonych połączeń heterocyklicznych i badaniu ich właściwości spektroskopowych jako fluorescencyjnych sensorów jonów metali i cząsteczek obojętnych. Ważne są dla nas także zagadnienia organokatalizy czy fotochemicznej katalizy procesów tworzenia nowych wiązań w cząsteczkach organicznych.

Opracowywane metodologie katalizy asymetrycznej umożliwiają syntezę docelowych związków z pełną kontrolą stereochemii w układach zarówno homo-, jak i heterogenicznych / **Zespół Stereokontrolowanej Syntezy Organicznej** /. Badania te dotyczą zastosowania prostych i ogólnie dostępnych związków organicznych w roli innowacyjnych katalizatorów istotnych przemian chemicznych oraz ich późniejszej implementacji w syntezie różnorodnych produktów: od małych

funkcjonalizacja alkenów



cząsteczek organicznych po oligosacharydy czy rozbudowane związki makrocykliczne. Opracowane przez nas metody zostały z powodzeniem zastosowane w syntezie związków biologicznie aktywnych zwanych *iminocukrami*, które wykorzystywane są w leczeniu nowotworów, cukrzycy, infekcji wirusowych oraz chorób rzadkich. Obecnie prowadzimy badania osadzonych na żywicach polimerowych katalizatorów na bazie proliny i jej pochodnych w asymetrycznej reakcji Michaela. Nasze badania skupiają się także na modyfikacjach i syntezie oligosacharydów – dotychczas przeprowadziliśmy z powodzeniem syntezę szkieletu pentacharydowego, ważnego związku przeciwzakrzepowego, jakim jest idraparyna sodowa. Dodatkowo pracujemy nad syntezą związków naturalnych, a także interesują nas metody otrzymywania mimetyków cukrów takich jak 5a-karbacukry. Skupiamy się także na badaniach dotyczących prowadzenia reakcji homo- i heterogenicznych w ciągłym przepływie w przeciwieństwie do procesów prowadzonych w kolbie.

Modyfikacja i funkcjonalizacja węglowodorów nienasyconych, zwłaszcza alkenów, cieszy się od lat ogromnym zainteresowaniem chemików. Alkeny są atrakcyjnymi substratami wykorzystywanymi nie tylko w badawczych laboratoriach chemicznych, ale przede wszystkim w przemyśle. Ich dostępność i niska cena sprawia, że są one idealnymi substratami do syntezy bardziej złożonych połączeń organicznych. Badania w dziedzinie funkcjonalizacji olefin obejmują addycje wolnych rodników generowanych z aktywnych CH-kwasów za pomocą wysokowalencyjnych kompleksów lantanowców lub z chlorowcopochodnych alifatycznych i aromatycznych przy użyciu niskowalencyjnych kompleksów wybranych metali przejściowych /**Zespół Chemii Związków Heterocyklicznych i Metaloorganicznych**/. Rozwijamy także tematykę fotokatalizy reakcji organicznych, którą ukierunkowujemy na difunkcjonalizację alkenów. Wykonujemy także badania z zakresu chemii bioortogonalnej, w których wykorzystujemy reakcje cykloaddycji (4+2) do obrazowania leków lub biocząsteczek w organizmach żywych bez oddziaływania na naturalne procesy biochemiczne. Dotychczas opracowaliśmy ścieżkę reakcji pozwalającą na połączenie heterodienów ze znacznikiem fluorescencyjnym, co umożliwia obserwację dystrybucji i metabolizmu leku w żywej komórce za pomocą mikroskopu konfokalnego lub fluorescencyjnego.



inhibitory oddziaływań białko-białko

oddziaływania lek-błona komórkowa

Zespół Fizykochemii Organicznej

Zespół Biologii Chemicznej i Projektowania Leków

Zespół Funkcjonalnych Materiałów Organicznych

Zespół Fizykochemii Zjawisk Międzyfazowych

Zespole Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

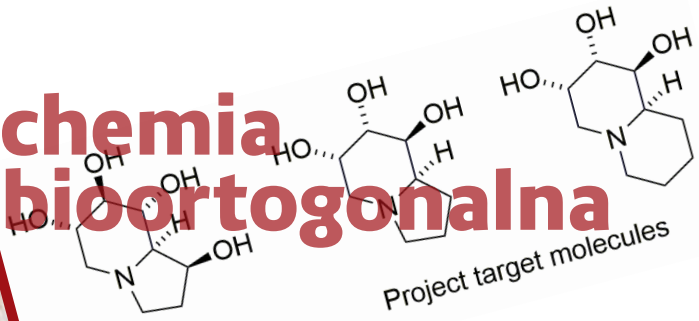
Pracujemy także nad pozyskaniem nowych wzorców fluorescencyjnych, a także nad wyjaśnieniem relacji pomiędzy strukturą i międzycząsteczkowymi oddziaływaniami w fazie krystalicznej związków heterocyklicznych i ich kompleksów a ich właściwościami fluorescencyjnymi i anizotropią fluorescencji monokryształów / **Zespół Fizykochemii Organicznej** /.

W kręgu naszych zainteresowań jest synteza nowych surfaktantów (szczególnie pochodnych perfluorowanych i semifluorowanych), jak również nietypowych związków powierzchniowo aktywnych o szerokim spektrum zastosowania / **Zespół Fizykochemii Zjawisk Międzyfazowych** /. Badania uzupełniamy o modelowanie układów chemicznych, takich jak bioaktywne związki heterocykliczne i ich metalokompleksy, policykliczne związki aromatyczne oraz polimery. Dodatkowo analizujemy zachowanie się związków aromatycznych w roztworach oraz wpływ rozpuszczalnika na efekt podstawnikowy, jak również zjawiska tautomerii i aromatyczności. Prowadzimy badania funkcjonalnych materiałów (bio)polimerowych (chitozan) oraz enzymów (ureaza) w aspekcie ich bio(zastosowań) w medycynie, między innymi w membranowych procesach separacyjnych oraz immobilizacji enzymów. Nasze zainteresowania badawcze obejmują także eksperymentalne i teoretyczne modelowanie błon biologicznych w układach dwuwymiarowych (techniką Langmuira) oraz analizę wpływu substancji bioaktywnych na właściwości biofizyczne błon, jak również weryfikację modeli na układach biologicznych. Uzyskiwane przez nas informacje umożliwiają wyznaczanie oddziaływań lek–błona w aspekcie badania mechanizmu działania leków, wyjaśnienie ich toksyczności oraz identyfikację celów molekularnych na powierzchni błony komórkowej. Technikę Langmuira z powodzeniem wykorzystujemy również do wytwarzania cienkich warstewek powierzchniowych o ściśle określonej grubości i pożądanej jakości, zarówno na powierzchni cieczy, jak i ciała stałego.

Intensywny rozwój chemii organicznej wraz z odkryciem zależności pomiędzy strukturą związków chemicznych a ich aktywnością biologiczną zaowocowały wprowadzeniem wielu

chemia bioortogonalna



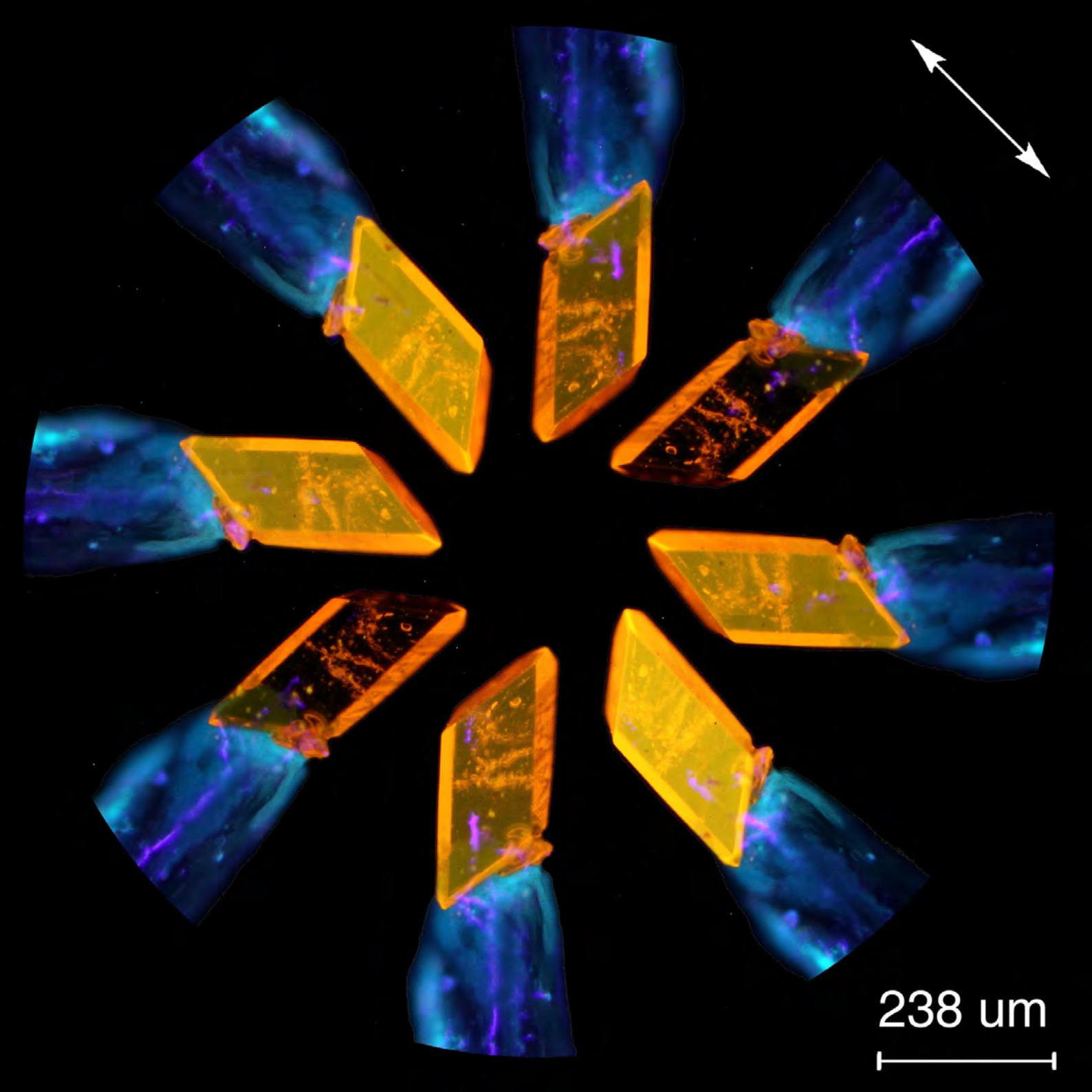


nowych syntetycznych substancji leczniczych. Zgodnie ze światowymi trendami syntezy leków nasze prace są skierowane na otrzymywanie niskocząsteczkowych związków chemicznych będących potencjalnymi lekami przeciwnowotworowymi, a także inhibitorami oddziaływań białko–białko /**Zespół Biologii Chemicznej i Projektowania Leków**/. W szczególności przedmiotem naszych badań są białka odgrywające kluczową rolę w cyklu komórkowym (p53, MDM2, USP7), jak również białka regulatorowe mechanizmu odpowiedzi immunologicznej (PD-1, PD-L1, VISTA). Współczesne immunoterapie przeciwnowotworowe oparte są na przeciwciałach monoklonalnych, które selektywnie blokują receptory immunologicznych punktów kontrolnych. Wśród naszych osiągnięć należy wymienić opracowanie nowego typu inhibitorów białka MDM2 – ważnego regulatora białka p53. Aktywacja białka p53, jaką obserwuje się po zahamowaniu MDM2, prowadzi do wstrzymania cyklu komórkowego komórek nowotworowych, a tym samym może przynieść korzystny efekt w terapii przeciwnowotworowej.

Prowadzone badania koncentrują się również na kontrolowanym otrzymywaniu zaplanowanych szkieletów węglowych o rozbudowanej chmurze π wraz z domieszkowaniem heteroatomem ubogim (bor) lub bogatym (azot) w elektrony i określenie obserwowanych właściwości optycznych. Kluczowa w planowanych szkieletach jest możliwość kontroli delokalizacji na bazie podstawowych modyfikacji chemicznych w kierunku fragmentów przełącznikowych w tym odwracalne zmiany charakteru z aromatycznego na antyaromatyczny /**Zespół Funkcjonalnych Materiałów Organicznych**/.

W **Zespole Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej** pracujemy nad otrzymywaniem nowych kokryształów i soli zawierających składniki aktywne farmakologiczne (w tym *multi drug co-crystals*). Inwestujemy nasz czas w badania biomateriałów i układów do kontrolowanego dostarczania leków. Aktywnie prowadzimy pomiary właściwości optycznych (absorpcja w zakresie UV-Vis, optyka liniowa i nieliniowa) zaprojektowanych przez nas faz krystalicznych.

Chemia organiczna stanowi podstawę nauk biologicznych i medycznych. O budowie i funkcjonowaniu organizmów żywych decydują związki organiczne, a wszystkie procesy biologiczne podlegają prawom chemii organicznej.


238 um

Zaawansowane narzędzia obliczeniowe. Modelowanie molekularne



dekompozycja

energii wiązania

spin-crossover

energetyka

stanów

spinowych

gęstość elektronowa

orbitale zlokalizowane

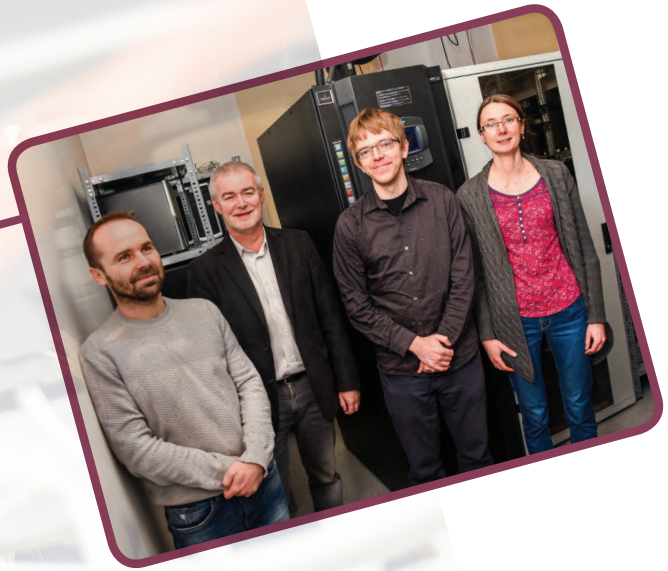
Grupa Modelowania Molekularnego Procesów Katalitycznych

Grupa Chemii Zeolitów

Zdefiniowanie praw mechaniki kwantowej zapoczątkowało jeden z największych przełomów w historii myśli ludzkiej. Zjawiska, z których obecności nie zdajemy sobie sprawy w życiu codziennym, takie jak *superpozycja, tunelowanie i splątanie*, okazują się mieć fundamentalne znaczenie zarówno na poziomie kwantowym, jak i w kształtowaniu mechanizmów decydujących o przebiegu procesów chemicznych i biologicznych. Mimo iż chemia jest bez wątpienia nauką eksperymentalną, trudno wyobrazić sobie współczesne badania w tej dziedzinie bez chemii teoretycznej i nieodłącznie z nią związanych metod obliczeniowych. Z jednej strony, metody te stanowią narzędzie predykcji właściwości molekularnych i mechanizmów reakcji. Z drugiej, istotnie wspomagają interpretację eksperymentu, a niekiedy nawet są traktowane jako techniki komplementarne w stosunku do eksperymentu. W istocie, we współczesnej chemii modele teoretyczne często definiują ramy interpretacyjne dla wyników eksperymentalnych.

Na naszym wydziale prowadzone są badania z zakresu szeroko rozumianej chemii teoretycznej i obliczeniowej – wykorzystujące zarówno metody chemii kwantowej, jak i termodynamiki statystycznej i klasycznej dynamiki molekularnej, jak również podejście chemoinformatyczne. Prowadzone są badania zarówno aplikacyjne (opis mechanizmów reakcji katalitycznych), jak i metodologiczne (rozwój nowych metodologii, protokołów i pakietów obliczeniowych).

Rozwój metod obliczeniowych chemii oraz wykorzystanie metodologii obliczeniowej jest potężnym narzędziem do opisu różnorodnych układów molekularnych. W nawiązaniu do prac eksperymentalnych prowadzonych na Wydziale specjalizujemy się w badaniach teoretycznych dotyczących różnych zagadnień z zakresu chemii metaloorganicznej, fizykochemii powierzchni i katalizy oraz spektroskopii molekularnej / **Grupa Modelowania Molekularnego Procesów Katalitycznych** /.



Rozwijamy metodologie związane z teoretycznym opisem wiązania chemicznego – w szczególności zaproponowaliśmy dwa nowe zbiory orbitali zlokalizowanych: Natural Orbitals for Chemical Valence, NOCV, i Localized Orbitals from Bond-Order Operator, LOBO oraz metodę dekompozycji energii wiązania ETS-NOCV. Prowadzimy badania dotyczące teoretycznego opisu roli energii kinetycznej i potencjalnej w wiązaniu chemicznym. Przedmiotem naszego zainteresowania są addukty supramolekularne oparte na anionowych kompleksach jonów metali d-elektronowych i cząsteczkach organicznych z niedoborem gęstości elektronowej, a także kompleksy metaloorganiczne wykazujące zjawisko *spin-crossover*, które modyfikujemy na drodze oddziaływania z powierzchniami tlenków metali i polarnymi cząsteczkami. Zajmujemy się charakterystyką oddziaływań w nano układach stanowiących potencjalne źródło wodoru cząsteczkowego, a także teoretycznym modelowaniem nowych układów polimerowych do zastosowań w ogniwach paliwowych.

Nasze obliczenia stanowią wsparcie oraz metodę weryfikacji doświadczalnych danych spektroskopowych opisujących właściwości fotofizyczne, aktywność optyczną oraz parametry widm FT-IR, NMR i EPR dla różnych układów molekularnych. Intensywnie rozwijamy nowe metody i narzędzia chemii kwantowej, wykorzystywane w obliczeniach i analizie parametrów spektroskopowych celem zrozumienia związków pomiędzy strukturą elektronową i geometryczną a obserwowanymi właściwościami materiałów chiralnych czy też układów katalitycznych opartych na metalach przejściowych. W oparciu o teoretyczne badania struktury geometrycznej i elektronowej definiujemy właściwości dwuwymiarowych półprzewodnikowych monowarstw osadzonych na podłożach metalicznych, charakteryzujemy czynniki warunkujące reaktywność jonów metalicznych w roztworze i na powierzchni tlenku metalu / **Grupa Modelowania Molekularnego Procesów Katalitycznych** /. Nasze pole zainteresowań obejmuje także modelowanie procesów katalitycznych opartych na oddziaływaniu cząsteczek sond z centrami kationowymi metali przejściowych w zeolitach lub centrami powierzchniowymi materiałów tlenkowych. Obliczenia weryfikowane są dostępnymi danymi pomiarowymi (energia adsorpcji, widma absorpcyjne FT-IR) i jednocześnie dostarczają dodatkowych informacji o mechanizmie aktywacji czy roli sieci zeolitu (na przykład przez wykorzystanie metody NOCV). W ostatnim czasie zainteresowaliśmy się testowaniem mechanizmów reakcji poprzez modelowanie reakcji elementarnych i poszukiwanie stanów przejściowych. Przewidujemy także rozszerzenie modelowania adsorpcji z jednej strony uwzględniając udane syntezy wielu nowych materiałów porowatych (nie tylko zeolitów, ale i metaloorganicznych struktur *metal organic framework*, MOF) a z drugiej – wykorzystanie metod pozwalających modelować izotermy/izobary adsorpcji, / **Grupa Chemii Zeolitów** /.

teoria rozszczepienia ekscytonu singletowego



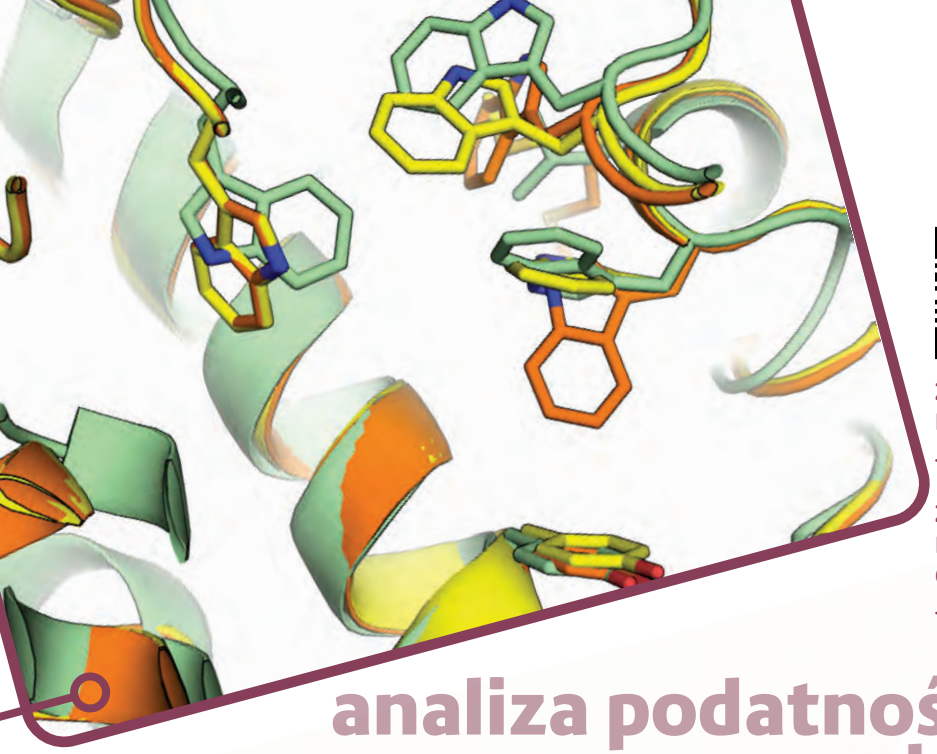
kryształy molekularne



Badania teoretyczne dotyczą także opisu struktury elektronowej, właściwości fizykochemicznych i aspektów reaktywności dla kompleksów metali przejściowych oraz modeli centrów metali w enzymach /**Zespół Chemii Koordynacyjnej**/. Wyniki obliczeń są konfrontowane z danymi eksperymentalnymi (spektroskopia UV-Vis, IR, EPR, dane termochemiczne i strukturalne). Ostatnie badania koncentrują się wokół stanów spinowych kompleksów metali. Prowadzone są poszukiwania protokołów obliczeniowych pozwalających wiarygodnie opisać energetykę stanów spinowych przy uwzględnieniu możliwego wpływu środowiska (rozpuszczalnik, sieć krystaliczna). Skomplikowana struktura elektronowa kompleksów metali oraz duże znaczenie efektów korelacji elektronowej wymaga zastosowania – obok popularnych metod DFT – także zaawansowanych metod opartych na funkcji falowej. Przedmiotem naszej ekspertyzy w zastosowaniach do kompleksów metali przejściowych są zarówno metody wieloreferencyjne, jak i metody sprzężonych klastrów. Prowadzone są również badania dotyczące mechanizmów aktywacji wiązania N-O na katalitycznych centrach metali z wykorzystaniem metod DFT i opartych na funkcji falowej. W kontekście chemii kwantowej istotne są dla nas także zagadnienia fizyki organicznych faz skondensowanych

korelacja elektronowa

/**Zespół Półprzewodników Organicznych**/. Tradycyjną tematyką jest tu teoria ekscytonów w kryształach molekularnych, ze szczególnym uwzględnieniem roli stanów z przeniesieniem ładunku oraz sprzężeń wibronowych. Wątek ten jest ostatnio rozbudowywany w kierunku teorii rozszczepienia ekscytonu singletowego oraz teoretycznego opisu (używanej do badania tego procesu) koherentnej spektroskopii femtosekundowej.



Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

Zespół Chemii Koordynacyjnej

Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

Zespół Półprzewodników Organicznych

analiza podatnościowa rozkładu ładunku

Do przewidywania liniowych i nieliniowych właściwości optycznych nowych materiałów wykorzystujemy metody kwantowo-chemiczne (QLFT), zaimplementowane w oprogramowaniu stworzonym i rozwijanym w **Zespole Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej**. Stosujemy także badania strukturalnego mechanizmu przejść fazowych w ferroikach metodami dynamiki molekularnej.

Metody dynamiki molekularnej stosujemy do badań struktury i oddziaływań w elektrolitach ciekłych i polimerowych, a także do badania transportu cząsteczek i jonów w tych układach. Połączenie symulacji dynamiki molekularnej z obliczeniami kwantowo-chemicznymi wykorzystywane jest do opisu efektów rozpuszczalnikowych w roztworach, w szczególności wpływu rozpuszczalnika na energie kompleksów oraz na widma elektronowe i oscylacyjne. Rozwijamy i doskonalimy metody fragmentacyjne chemii kwantowej, które w przyszłości będą wykorzystywane do wyznaczenia struktury elektronowej wielkich układów molekularnych / **Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych** /. Nasze badania są skoncentrowane na opracowaniu metodologicznie i numerycznie spójnego formalizmu, który można stosować do układów trójwymiarowych. Bardzo ciekawą techniką obliczeniową autorstwa naszych pracowników jest analiza podatnościowa rozkładu ładunku (Charge Sensitivity Analysis, CSA) wywodząca się z konceptualnej teorii funkcjonałów gęstości. Przydatność CSA do opisu reaktywności chemicznej została zademonstrowana w różnych rozdzielczościach metody, od lokalnej po globalną. Pakiet obliczeniowy CSA w rozdzielczości atomowej dostępny jest dla wszystkich potencjalnych użytkowników. Kolejnym narzędziem opracowanym przez nas są schematy podziału energii oddziaływania, oparte na właściwościach topologicznych hiperpowierzchni energii w przestrzeni populacyjnej. Daje to nową perspektywę na rolę energii przeniesienia ładunku w procesach chemicznych.

dynamika molekularna kompleksy inkluzyjne





Poza rozwojem metod obliczeniowych i ich implementacji w pakietach obliczeniowych wykorzystujemy cały wachlarz metod obliczeniowych, tak klasycznych, jak i kwantowych, do opisu reaktywności i właściwości fizykochemicznych **układów molekularnych o znaczeniu biomedycznym**. Główny nacisk kładziemy na kompleksy inkluzyjne tworzone przez cząsteczki eterów koronowych, cyklodekstryn i kaliksarenów. Symulacje metodami klasycznej dynamiki molekularnej (MD, Molecular Dynamics) stały się naszym podstawowym narzędziem stosowanym do opisu właściwości fizykochemicznych monowarstw fosfolipidowych, wykorzystywanych jako modele błon biologicznych. Badania układów modelowych pozwalają określić molekularny mechanizm aktywności antybakteryjnej wybranych leków, a tym samym stwarzają podstawy do projektowania nowych bardziej aktywnych terapeutyków. Jest to istotne zagadnienie w związku ze zwiększającą się lekoopornością bakterii na tradycyjne antybiotyki. Poza tym badamy wpływ zanieczyszczeń i czynników utleniających na właściwości fizykochemiczne układów modelujących powierzchnię pęcherzyków płucnych.



projektowanie leków

molekularne dokowanie

profil farmakodynamiczny

Zespół Biokrystalografi

Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych

Analiza struktur krystalicznych oraz zaawansowane metody modelowania molekularnego umożliwiają nam powiązanie cech strukturalnych i elektronowych, które wyróżniają i definiują cząsteczkę bioaktywną względem wybranego makromolekularnego celu terapeutycznego / **Zespół Biokrystalografii** /. Nasze badania ukierunkowane są na poszukiwanie oraz projektowanie nowych, potencjalnych ligandów wybranego białka, bazując na predykcyjnych metodach komputerowo wspomaganego projektowania leków. Głównym narzędziem prowadzonych badań jest wykorzystanie dostępnych baz danych (CSD, PDB, ChEMBL) oraz oprogramowania pozwalającego na przeprowadzenie eksperymentów dokowania molekularnego. Zadania badawcze realizowane są wielokierunkowo, począwszy od analizy właściwości sterycznych i elektronowych małej cząsteczki w oparciu o wyniki rentgenowskiej analizy strukturalnej oraz optymalizację geometrii metodami kwanto-wo-mechanicznymi, po określenie prawdopodobnego sposobu wiązania ligand–białko, oraz zaproponowanie modyfikacji strukturalnych w celu otrzymania związku o lepszym profilu farmakodynamicznym. Nasze badania pozwalają zatem na zwiększenie prawdopodobieństwa sukcesu w projektowaniu leków. Głównym obiektem zainteresowań jest analiza zależności pomiędzy strukturą i aktywnością ligandów działających na wybrane receptory sprzężone z białkiem G (głównie receptory serotoninowe i dopaminowe, powiązane z etiologią wielu chorób centralnego układu nerwowego). Z uwagi na wciąż ograniczoną ilość informacji strukturalnych dla tej klasy receptorów prowadzone są również prace związane z budowaniem i weryfikacją przestrzennych modeli tych białek. Bogactwo modeli i koncepcji metodologii obliczeniowych jest potężnym wsparciem dla wyników eksperymentalnych.



Struktura Wydziału Chemii

ZAKŁAD CHEMII ANALITYCZNEJ



Kierownik Zakładu
dr hab. Jolanta Kochana, prof. UJ | jolanta.kochana@uj.edu.pl | **ORCID** 0000-0002-6256-8078
Czujniki i bioczujniki; Elektroanaliza; Nanomateriały w konstrukcji (bio)czujników; Analiza środowiskowa i farmaceutyczna

Zespół Analiz Sądowych i Klinicznych | ZAKŁAD CHEMII ANALITYCZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Paweł Kościelniak | pawel.koscielniak@uj.edu.pl | **ORCID** 0000-0001-5380-5767
Chemia analityczna; Analiza przepływowa; Chemia sądowa; Kalibracja analityczna



dr hab. Michał Woźniakiewicz, prof. UJ | michal.wozniakiewicz@uj.edu.pl | **ORCID** 0000-0002-1348-2884
Chemia sądowa; Toksykologia; Techniki separacyjne; Elektroforeza kapilarna



dr hab. Renata Wietecha-Posłuszny | renata.wietecha-posluszny@uj.edu.pl | **ORCID** 0000-0001-8908-6725
Chemia analityczna; Analiza materiału biologicznego; Toksykologia sądowa; Metody separacyjne

Zespół Analiz Środowiskowych i Biomedycznych | ZAKŁAD CHEMII ANALITYCZNEJ



Kierownik
dr hab. Jolanta Kochana, prof. UJ | jolanta.kochana@uj.edu.pl | **ORCID** 0000-0002-6256-8078
Czujniki i bioczujniki; Elektroanaliza; Nanomateriały w konstrukcji (bio)czujników; Analiza środowiskowa i farmaceutyczna



dr hab. Joanna Kozak, prof. UJ | j.kozak@uj.edu.pl | **ORCID** 0000-0002-1242-7920
Analiza przepływowa; Analiza wieloskładnikowa; Mikroprzepływowe czujniki chemiczne; Analiza środowiskowa, żywności, farmaceutyczna



dr hab. Marcin Wieczorek | marcin.wieczorek@uj.edu.pl | **ORCID** 0000-0002-1578-0906
Chemia analityczna; Analiza przepływowa; Analityczna spektrometria atomowa; Ablacja laserowa

Zespół Analiz Toksykologicznych i Farmaceutycznych | ZAKŁAD CHEMII ANALITYCZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. n. med. Wojciech Piekoszewski | piekosze@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-5718-9797
Toksykologia; Proteomika żywności; Metabolomika



dr hab. Katarzyna Madej | madejk@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-6411-2288
Toksykologiczna analiza żywności; Analiza toksykologiczna kliniczna; Analiza pestycydów; Analiza leków

ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII



Kierownik Zakładu
dr hab. Paweł Wydro, prof. UJ | wydro@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9145-1362
Monowarstwy i dwuwarstwy lipidowe; Modelowe błony komórkowe; Cząsteczki bioaktywne; Mikroskopia kąta Brewstera

Zespół Badań Fotochemicznych i Luminescencyjnych | ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII



Kierownik
dr hab. Mariusz Kępczyński, prof. UJ | kepczyns@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7304-6881
Nanocząstki polimerowe; Mikroskopia optyczna i fluorescencyjna; Układy koloidalne; Fotochemia związków organicznych



dr hab. Andrzej Turek | turek@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-6967-9731
Rozdzielanie krzywych wielowymiarowych; Elektronowa struktura i widma polienów; Fotoizomeryzacja; Rotameryzm alpha,omega-diarylopolienów

Zespół Elektrochemii | ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII



Kierownik
prof. dr hab. Grzegorz Sulka | sulka@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-7431-617X
Nanoporowate anodowe tlenki metali; Układy nanodrutów do elektrokatalizy; Fotoelektrochemia półprzewodników; Materiały do konwersji i magazynowania energii



dr hab. Leszek Zaraska | leszek.zaraska@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-5330-7191
Elektrochemia; Elektrochemiczne wytwarzanie nanomateriałów; Nanostrukturalne materiały półprzewodnikowe; Nanomateriały do konwersji i magazynowania energii

Zespół Fizykochemii Powierzchni | ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII



Kierownik
dr hab. Paweł Wydro, prof. UJ | wydro@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9145-1362
Monowarstwy i dwuwarstwy lipidowe; Modelowe błony komórkowe; Cząsteczki bioaktywne; Mikroskopia kąta Brewstera



dr hab. Beata Korchowiec, prof. UJ | bkorch@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-3950-7514
Chemia fizyczna powierzchni; Technologia filmów Langmuira i Langmuir-Blodgett; Modelowe membrany komórkowe; Amfifilowe związki makrocykliczne

Zespół Nanotechnologii Polimerów i Biomateriałów | ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII



Kierownik
prof. dr hab. Szczepan Zapotoczny | s.zapotoczny@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-6662-7621
Szczotki polimerowe; Kapsuły polimerowe; Polimery przewodzące; Mikroskopia sił atomowych



prof. dr hab. Krzysztof Szczubiałka | k.szczubialka@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-6612-1102
Biomateriały; Polimery; Fotochemia; Koloidy



dr hab. Anna Karewicz | anna.karewicz@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-9769-6240
Biomateriały; Polimery; Kontrolowane dostarczanie leków; Nano- i mikronośniki leków



dr hab. Joanna Lewandowska-Łańcucka | lewandow@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-5447-4936
Biopolimerowe materiały hydrożelowe; Nośniki leków; Rusztowania komórkowe; Inżynieria tkankowa kości

dr hab. Łukasz Łapok | lukasz.lapok@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7788-4321
Synteza organiczna; Fizykochemia organiczna; Barwniki funkcjonalne; Emitery

dr hab. Tomasz Uchacz | tomasz.uchacz@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-5511-0686
Fotochemia; Procesy przeniesienia elektronu; Organiczna fotowoltaika; Organiczna optyka nieliniowa

Zespół Spektroskopii Molekularnej | ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII

Kierownik
dr hab. Marek Boczar, prof. UJ | marek.boczar@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-5380-9685
Wiązania wodorowe

ZAKŁAD CHEMII NIEORGANICZNEJ

Kierownik Zakładu
prof. dr hab. Kinga Góra-Marek | kinga.gora-marek@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-1296-9244
Chemia materiałów glinokrzemianowych; Spektroskopia IR w modzie in situ oraz operando; Kataliza; Materiały mikro- i mezoporowate

Zespół Badań Materiałów Roślinnych | ZAKŁAD CHEMII NIEOGRANICZNEJ

Kierownik
dr hab. Magdalena Kurdziel | mk.kurdziel@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-0136-3762
Skrobia; Stabilne rodniki organiczne; Modyfikacje skrobi

dr hab. Beata Nowicka, prof. UJ | beata.nowicka@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-1611-0119
Chemia koordynacyjna; Cienkie warstwy; Nanokompozyty; Właściwości magnetyczne

Zespół Chemii Koordynacyjnej | ZAKŁAD CHEMII NIEOGRANICZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Janusz Szklarzewicz | janusz.szklarzewicz@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-9747-9238
Chemia koordynacyjna; Molibden; Wolfram; Wanad



dr hab. Dariusz Matoga, prof. UJ | dariusz.matoga@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-0064-5541
Sieci metalo-organiczne; Chemia koordynacyjna; Materiały funkcjonalne; Projektowanie i synteza



dr hab. Mariusz Radoń | mariusz.radon@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-1901-8521
Obliczeniowa chemia (bio)koordynacyjna; Chemia kwantowa;
Struktura elektronowa kompleksów metali przejściowych; Metody DFT, wielokonfiguracyjne i sprzężonych klastrów

Zespół Fizykochemii Koordynacyjnej i Bionieorganicznej | ZAKŁAD CHEMII NIEOGRANICZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Grażyna Stochel | stochel@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9502-6371
Chemia bionieorganiczna; Fotochemia; Materiały funkcjonalne



prof. dr hab. Wojciech Macyk | macyk@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-1317-6115
Fotokataliza; Fotochemia; Konwersja energii słonecznej; Mechanizmy reakcji fotokatalitycznych



dr hab. Małgorzata Brindell, prof. UJ | malgorzata.brindell@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9827-4661
Chemia bionieorganiczna i medyczna; Fotochemia i fotofizyka związków koordynacyjnych;
Modyfikacja białek do zastosowań biomedycznych; Terapia i diagnostyka nowotworów



dr hab. Janusz Dąbrowski, prof. UJ | jdabrows@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-8791-7035
Fotodiagnostyka i terapia fotodynamiczna; Porfiryny; Reaktywne formy tlenu



dr hab. Agnieszka Kyzioł , prof. UJ | kyziol@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-5563-4508
Chemia bionieorganiczna i medyczna; Materiały funkcjonalne; Biomateriały; Modyfikacja powierzchni



dr hab. Łukasz Orzeł | lukasz.orzel@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-6943-7441
Metaloporfiryny; Reaktywne formy tlenu i tlenku azotu; Kinetyka i mechanizmy reakcji; Fotofizyka i fotochemia

Zespół Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego | ZAKŁAD CHEMII NIEOGRANICZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Zbigniew Sojka | sojka@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-7226-7626
Tlenki; Spektroskopia/mikroskopia elektronowa; Kataliza



prof. dr hab. Barbara Gil | barbara.k.gil@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-4096-0762
Zeolity; Materiały MOF; Mateiały warstwowe; Zastosowania biomedyczne



prof. dr hab. Kinga Góra-Marek | kinga.gora-marek@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-1296-9244
Chemia materiałów glinokrzemianowych; Spektroskopia IR w modzie in situ oraz operando; Kataliza; Materiały mikro- i mezoporowate



prof. dr hab. Andrzej Kotarba | kotarba@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-4815-0051
Chemia powierzchni; Kataliza; Nanomateriały; Biomateriały



prof. dr Wiesław Roth | wieslaw.roth@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-4090-8043
Materiały mikro- i mezoporowate; Materiały warstwowe (2D); Synteza zeolitów



dr hab. Krzysztof Kruczała, prof. UJ | kruczala@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-1241-6789
Elektrokataliza; Nanomateriały; Spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego; Degradacja polimerów i jej zapobieganie



dr hab. Piotr Pietrzyk, prof. UJ | piotr.pietrzyk@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7808-1280
Chemia materiałów; Kataliza środowiskowa; Spektroskopia EPR; Modelowanie DFT



dr hab. Witold Piskorz, prof. UJ | wpiskorz@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-3462-436X
Modelowanie wieloskalowe; Chemia obliczeniowa; Kataliza; Tlenki metali przejściowych



dr hab. Ewa Bidzińska | bidzinsk@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-4481-368X
Spektroskopia EPR; Skrobia; Wolne rodniki; Kataliza



dr hab. Paweł Kozyra | kozyra@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7168-5022
Modelowanie molekularne; Zeolity; Kataliza heterogeniczna



dr hab. Paweł Stelmachowski | pawel.stelmachowski@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-1126-8101
Chemia powierzchni; Chemia materiałów; Kataliza heterogeniczna; Elektrokataliza



dr hab. Filip Zasada | zasada@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-2815-0644
Kataliza heterogeniczna; Modelowanie molekularne; Termodynamika ab initio; Fizykochemia powierzchni

Zespół Katalizy i Fizykochemii Powierzchni Ciała Stałego II | ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII



Kierownik
prof. dr hab. Wacław Makowski | waclaw.makowski@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-4055-9664
Sieci metaloorganiczne (MOF); Materiały porowate; Adsorpcja; Zeolity

Zespół Kinetyki Reakcji Heterogenicznych | ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII



Kierownik
prof. dr hab. Joanna Paczkowska | lojewska@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-1937-8452
Chemia ciała stałego; Kataliza; Kinetyka chemiczna; Chemia konserwatorska

Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych | ZAKŁAD CHEMII FIZYCZNEJ I ELEKTROCHEMII



Kierownik
dr hab. Dawid Pinkowicz, prof. UJ | dawid.pinkowicz@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9958-3116
Fotomagnetyzm; Magnetyzm molekularny; Związki koordynacyjne i metaloorganiczne o nietypowej budowie



prof. dr hab. Barbara Sieklucka | barbara.sieklucka@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-3211-5008
Multifunkcjonalne materiały molekularne; Sieci koordynacyjne; Magnetyzm molekularny; Policynidometalany



dr hab. Robert Podgajny, prof. UJ | robert.podgajny@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-7457-6799
Chemia koordynacyjna i supramolekularna; Inżynieria krystaliczna; Rozpoznawanie i wiązanie anionów; Magnetyzm molekularny



dr hab. Szymon Chorąży | simon.chorazy@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-1669-9835
Fotoluminescencja; Magnetyzm molekularny; Właściwości dielektryczne

ZAKŁAD CHEMII OGÓLNEJ



Kierownik Zakładu
prof. dr hab. Patrycja Dynarowicz-Łątka | patrycja.dynarowicz-latka@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9778-6091
Granica faz woda-powietrze; Monowarstwy; Cienkie filmy powierzchniowe; Oddziaływania międzycząsteczkowe

Zespół Fizykochemii Zjawisk Międzyfazowych | ZAKŁAD CHEMII OGÓLNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Patrycja Dynarowicz-Łątka | patrycja.dynarowicz-latka@uj.edu.pl**| ORCID** 0000-0002-9778-6091
Granica faz woda-powietrze; Monowarstwy; Cienkie filmy powierzchniowe; Oddziaływania międzycząsteczkowe



dr hab. Barbara Krajewska, prof. UJ | krajewsk@chemia.uj.edu.pl**| ORCID** 0000-0003-3546-9733
Biokataliza; Biopolimery; Separacje membranowe



dr hab. Krzysztof Zborowski | zborowsk@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-6042-2510
Chemia obliczeniowa; Spektroskopia teoretyczna; Aromatyczność; Symulacje związków bioaktywnych

ZAKŁAD CHEMII ORGANICZNEJ



Kierownik Zakładu
dr hab. Aleksandra Pałasz | palasz@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7952-2826
Reakcja cykloaddycji Dielsa-Alder; Chemia bioortogonalna; C-glikozydy; Uracyle

Zespół Biologii Chemicznej i Projektowania Leków | ZAKŁAD CHEMII ORGANICZNEJ



Kierownik
p.o. dr Łukasz Skalniak | lukasz.skalniak@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-6707-6697
Biologia chemiczna; NMR; Inhibitory małocząsteczkowe; Immuno-onkologia

Zespół Chemii Związków Heterocyklicznych i Metaloorganicznych | ZAKŁAD CHEMII ORGANICZNEJ



Kierownik
dr hab. Dariusz Cież |dariusz.ciez@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-7227-6143
Związki heterocykliczne; Reakcje redoks; Chemia metaloorganiczna; Synteza organiczna

Zespół Fizykochemii Organicznej | ZAKŁAD CHEMII ORGANICZNEJ

Kierownik
dr hab. Katarzyna Ostrowska |ostrowsk@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-6425-5331
Organiczne i koordynacyjne luminofory; Fluorescencyjne sensory; Skondensowane układy heterocykliczne

Zespół Stereokontrolowanej Syntezy Organicznej | ZAKŁAD CHEMII ORGANICZNEJ

Kierownik
dr hab. Aleksandra Pałasz | palasz@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7952-2826
Reakcja cykloaddycji Dielsa-Alder; Chemia bioortogonalna; C-glikozydy; Uracyle

Zespół Funkcjonalnych Materiałów Organicznych | ZAKŁAD CHEMII ORGANICZNEJ

Kierownik
dr hab. Miłosz Pawlicki, prof. UJ | pawlicki@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-8249-0474
Synteza organiczna; Aromatyczność; Spektroskopia; Makrocykle

ZAKŁAD CHEMII ŚRODOWISKA

Kierownik Zakładu
dr hab. Katarzyna Hąc-Wydro, prof. UJ | hac@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-3470-0403
Zjawiska powierzchniowe w chemii środowiska; Modele błon; Surfaktanty; Mikroskopia kąta Brewstera

Zespół Katalizy Środowiskowej | ZAKŁAD CHEMII ŚRODOWISKA

Kierownik
dr hab. Andrzej Adamski, prof. UJ | adamski@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-1806-7567
Kataliza środowiskowa; Procesy zrównoważone; Układy tlenkowe; Synteza i spektroskopia

Zespół Fizykochemicznych Badań Środowiskowych | ZAKŁAD CHEMII ŚRODOWISKA

Kierownik
dr hab. Katarzyna Hąc-Wydro, prof. UJ | hac@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-3470-0403
Zjawiska powierzchniowe w chemii środowiska; Modele błon; Surfaktanty; Mikroskopia kąta Brewstera



dr hab. Marcin Broniatowski, prof. UJ | broniato@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-0292-1826
Chemia środowiska; Modele błon biologicznych; Monowarstwy Langmuira; Trwałe zanieczyszczenia organiczne

ZAKŁAD CHEMII TEORETYCZNEJ



Kierownik Zakładu
prof. dr hab. Jacek Korchowiec | korchow@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9698-7369
Konceptualna teoria funkcjonałów gęstości; Analiza podatnościowa rozkładu ładunków; Metody chemii kwantowej klasy o(N); Modelowanie układów biomedycznych

Zespół Chemii Kwantowej | ZAKŁAD CHEMII TEORETYCZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Artur Michalak | michalak@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-1408-5474
Teorie wiązania chemicznego; NOCV; Katalizatory metaloorganiczne; Ogniwa paliwowe



dr hab. Mariusz Mitoraj, prof. UJ | mitoraj@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-5359-9107
Teorie wiązania chemicznego; Modelowanie procesów katalitycznych; Modelowanie własności fizycznych oraz fotofizycznych materii



dr hab. Monika Srebro-Hooper, prof. UJ | monika.srebro@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-4211-325X
Obliczenia kwantowo-chemiczne; Obliczeniowa spektroskopia molekularna; Stany wzbudzone; Aktywność optyczna



dr hab. James Hooper | james.hooper@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-3859-6172
Obliczenia kwantowo-chemiczne układów periodycznych; Wyznaczanie struktury atomowej; Analiza struktury elektronowej; Obliczeniowa chemia powierzchni

Zespół Teoretycznej Fizyki Molekularnej | ZAKŁAD CHEMII TEORETYCZNEJ



Kierownik
dr hab. Marcin Andrzejak | andrzeja@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-1798-7249
Stany wzbudzone; Aktywność wibronowa w przejściach elektronowych; Rozszczepienie ekscytonów singletowych; Magnetyczny dichroizm kołowy

Zespół Termodynamiki i Dynamiki Reakcji Chemicznych | ZAKŁAD CHEMII TEORETYCZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Jacek Korchowiec | korchow@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9698-7369
Konceptualna teoria funkcjonałów gęstości; Analiza podatnościowa rozkładu ładunków; Metody chemii kwantowej klasy o(N); Modelowanie układów biomedycznych

ZAKŁAD DYDAKTYKI CHEMII



Kierownik Zakładu
prof. dr hab. Wacław Makowski | waclaw.makowski@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-4055-9664
Dydaktyka chemii na poziomie szkoły średniej i wyższej; Doskonalenie zawodowe nauczycieli chemii



dr Paweł Bernard, prof. UJ | pawel.bernard@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-8618-3447
Dydaktyka chemii na poziomie szkoły średniej i wyższej; Nauczanie oparte na samodzielnym dociekaniu wiedzy przez uczniów; Technologie informacyjno-komunikacyjne w edukacji; Druk 3D



dr Iwona Maciejowska, prof. UJ | iwona.maciejowska @uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-3788-4853
Dydaktyka chemii na poziomie szkolnym i uniwersyteckim; Dydaktyka akademicka; Pedeutologia; Rozwój kompetencji dydaktycznych nauczycieli akademickich

ZAKŁAD FIZYKI CHEMICZNEJ



Kierownik Zakładu
prof. dr hab. Małgorzata Barańska | baranska@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-8826-3144
Spektroskopia molekularna; Obrazowanie ramanowskie; Oscylacyjna aktywność optyczna:ROA i VCD; Analiza biomedyczna in vitro i ex vivo

Zespół Badań Przemian Fazowych | ZAKŁAD FIZYKI CHEMICZNEJ



Kierownik
dr hab. Łukasz Hetmańczyk | lukasz.hetmanczyk@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-6725-9859
Przemiany fazowe w ciele stałym; Spektroskopia oscylacyjna (IR, RS, INS); Metody rozpraszania neutronów; Struktura i dynamika reorientacyjna



dr hab. Joanna Hetmańczyk | joanna.hetmanczyk@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7437-0827
Przemiany fazowe; Spektroskopia IR i Ramana; Reorientacja molekularna; Metody rozpraszania neutronów (IINS, NPD, QENS)



dr hab. Elżbieta Szostak | szostak@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-5576-2120
Badania polimorfizmu ciał stałych w funkcji temperatury; Związki koordynacyjne z ligandem DMSO; Materiały magazynujące energię; Kryształy plastyczne

Zespół Obrazowania Ramanowskiego | ZAKŁAD FIZYKI CHEMICZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Małgorzata Barańska | baranska@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-8826-3144
Spektroskopia molekularna; Obrazowanie ramanowskie; Aktywność optyczna i polimorfizm; Analiza próbek medycznych i metabolitów roślin



dr hab. Agnieszka Kaczor, prof. UJ | agnieszka.kaczor@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-8337-8567
Nowoczesne techniki spektroskopii ramanowskiej; Okołonaczyniowa tkanka tłuszczowa; Wibracyjna aktywność optyczna: VCD&ROA; Indukcja i amplifikacja chirlalności



dr hab. Kamilla Małek, prof. UJ | kamilla.malek@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-0582-2743
Biospektroskopia molekularna; Powierzchniowo wzmocniona spektroskopia ramanowska SERS i jej nanoczujniki; Obrazowanie FTIR; Chemia medyczna

Zespół Spektroskopii Oscylacyjnej | ZAKŁAD FIZYKI CHEMICZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Aleksandra Wesełucha-Birczyńska | birczyns@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-2544-1836
Spektroskopia ramanowska; Korelacja dwuwymiarowa (2D); Biomateriały; Malaria



prof. dr hab. Leonard Proniewicz | proniewi@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-4028-3186
Fizyka chemiczna; Badania struktur molekularnych; Spektroskopia: Ramana, IR i NMR; Obliczenia kwantowo-chemiczne

ZAKŁAD KRYSTALOCHEMII I KRYSTALOFIZYKI



Kierownik Zakładu
dr hab. Justyna Kalinowska-Tłuścik | justyna.kalinowska-tluscik@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-7714-1651
Krystalochemia; Projektowanie związków bioaktywnych; Poszukiwanie zależności struktura-aktywność biologiczna; Metody in silico w projektowaniu leków

Zespół Biokrystalografii | ZAKŁAD KRYSTALOCHEMII I KRYSTALOFIZYKI



Kierownik
prof. dr hab. Krzysztof Lewiński | lewinski@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-3074-7175
Krystalografia białek; Struktura wysokociśnieniowa; Chemia biologiczna; Analiza strukturalna



dr hab. Justyna Kalinowska-Tłuścik | justyna.kalinowska-tluscik@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-7714-1651
Krystalochemia; Projektowanie związków bioaktywnych; Poszukiwanie zależności struktura-aktywność biologiczna Metody in silico w projektowaniu leków



dr hab. Katarzyna Kurpiewska | katarzyna.kurpiewska@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-6102-313X
Badania strukturalne; Biokrystalografia; Chemia biologiczna; Biochemia

Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej | ZAKŁAD KRYSTALOCHEMII I KRYSTALOFIZYKI



Kierownik
dr hab. Marlena Gryl | gryl@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0003-2267-1588
Inżynieria krystaliczna; Krystalografia kwantowa; Liniowe i nieliniowe właściwości optyczne; Kokryształy leków

Zespół Strukturalnej Dyfraktometrii Proszkowej | ZAKŁAD KRYSTALOCHEMII I KRYSTALOFIZYKI



Kierownik
prof. dr hab. Wiesław Łasocha | lasocha@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-7083-1860
Dyfraktometria proszkowa; Nieorganiczno-organiczne materiały hybrydowe; Polioksometalany i peroksometalany; Badania rentgenowskie objektów zabytkowych

ZAKŁAD METOD OBLICZENIOWYCH CHEMII



Kierownik Zakładu
dr hab. Adrzej Eilmes, prof. UJ | andrzej.eilmes@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-4690-2611
Procesy elektronowe w fazie skondensowanej; Transport jonów w elektrolitach; Efekty rozpuszczalnikowe; Modelowanie molekularne



dr hab. Mariusz Mitoraj, prof. UJ | mitoraj@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-5359-9107
Teorie wiązania chemicznego; Modelowanie procesów katalitycznych; Modelowanie własności fizycznych oraz fotofizycznych materii

Zespół Półprzewodników Organicznych | ZAKŁAD METOD OBLICZENIOWYCH CHEMII



Kierownik
dr hab. Andrzej Eilmes, prof. UJ | andrzej.eilmes@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-4690-2611
Procesy elektronowe w fazie skondensowanej; Transport jonów w elektrolitach; Efekty rozpuszczalnikowe; Modelowanie molekularne



dr hab. Grzegorz Mazur | mazur@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-7204-1926
Metody obliczeniowe chemii kwantowej; Zależna od czasu teoria funkcjonału gęstości; Elektronowe stany wzbudzone

ZAKŁAD TECHNOLOGII CHEMICZNEJ



Kierownik Zakładu
prof. dr hab. Lucjan Chmielarz | lucjan.chmielarz@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7753-6204
Kataliza; Ochrona środowiska; Inżynieria materiałowa; Technologia chemiczna

Zespół Chemicznych Technologii Środowiskowych | ZAKŁAD TECHNOLOGII CHEMICZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Lucjan Chmielarz | lucjan.chmielarz@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-7753-6204
Kataliza; Ochrona środowiska; Inżynieria materiałowa; Technologia chemiczna



dr hab. Agnieszka Węgrzyn | wegrzyn@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-9835-9825
Inżynieria materiałowa; Minerały naturalne i syntetyczne; Procesy sorpcyjne i katalityczne; Technologie oczyszczania wody

Zespół Technologii Materiałów i Nanomateriałów | ZAKŁAD TECHNOLOGII CHEMICZNEJ



Kierownik
dr hab. Marcin Molenda, prof. UJ | marcin.molenda@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-6566-7103
Technologia (nano)materiałów; Akumulatory Li-ion i Na-ion; Technologie zrównoważone; Magazynowanie energii



dr hab. Dorota Majda | majda@chemia.uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0002-6578-9677
Analiza termiczna; Termoporometria; Materiały mezoporowate; Zeolity

Zespół Technologii Organicznej | ZAKŁAD TECHNOLOGII CHEMICZNEJ



Kierownik
prof. dr hab. Piotr Kuśtrowski | piotr.kustrowski@uj.edu.pl **| ORCID** 0000-0001-8496-0559
Kataliza heterogeniczna; Technologia chemiczna; Materiały porowate; Spektroskopia fotoelektronowa

Oferta i zaplecze badawcze

Pracownia/ Zespół **Grupa Chemii Powierzchni i Materiałów**

Kierownik **prof. dr hab. Andrzej Kotarba**

Badania Realizowane usługi obejmują charakterystykę materiałów katalitycznych pod względem składu (analiza składu pierwiastkowego), właściwości elektronowych (praca wyjścia), stabilności materiałów (termicznej, w zawiesinach) oraz badania prokatalityczne (reaktywność powierzchni). Wykonywane są badania powierzchni materiałów implantacyjnych (energia powierzchniowa, kąt zwilżania, stabilność) oraz funkcjonalizacja i charakterystyka powierzchni materiałów polimerowych/węglowych.

Aparatura sonda Kelvina (McAllister KP 6500), XRF (ThermoFisher ARL Quant'X), NTA (Nanosight LM10), kąt zwilżania (OEG, Surftens universal), analiza termograwimetryczna (Mettler Toledo TGA/DSC1), testy termoprogramowane (TPR, TPO, TPD, reaktywność – własna aparatura), generator plazmy (Diener Electronic, Femto)

Kontakt msc.chemia.uj.edu.pl



Pracownia / Zespół **Grupa Chemii Zeolitów**

Kierownik **prof. dr hab. Barbara Gil**

Badania Pomiar widm IR proszków, zawiesin oraz cieczy technikami transmisyjnej IR oraz ATR.
Badania kwasowości (ilościowe i jakościowe) oraz właściwości redoks (jakościowe) z zastosowaniem cząsteczek-sond: amoniak, pirydyna, CO, CO_2, acetonitryl, trimetyloacetonitryl, inne cząsteczki na podstawie indywidualnych ustaleń.
Forma pomiaru: pastylki w KBr, samonośne, warstwy nanoszone na pastylki krzemowe, kuwety cieczowe o regulowanej grubości warstwy.

Aparatura spektrometry Tensor 27 oraz Equinox w zakresie średniej podczerwieni (8000 – 400 cm^{-1}), jednoodbiciowa przystawka diamentowa, kuwety cieczowe, własnej produkcji kuwety do badań adsorpcji z fazy gazowej (regulowana temperatura -100°C do 600°C)

Kontakt **prof. dr hab. Barbara Gil,** gil@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 668 2469



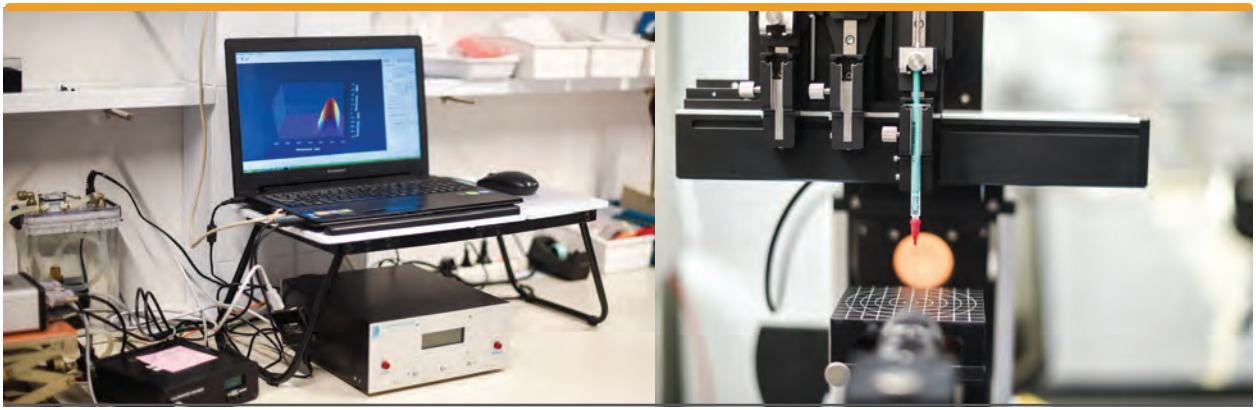
Pracownia / Zespół **Laboratorium Badań Elektrochemicznych**

Kierownik **prof. dr hab. Grzegorz Sulka**

Badania Elektrochemiczna synteza materiałów i biomateriałów nanostrukturalnych o ściśle określonej morfologii i składzie.
Kompleksowa charakterystyka procesów elektrodowych technikami elektrochemicznymi (np. badanie procesu korozji i kinetyki reakcji elektrodowych, metody elektroanalityczne).
Optyczna i elektrochemiczna charakterystyka materiałów półprzewodnikowych.

Aparatura potencjostaty: Gamry Reference 3000, Bio-Logic SP-300, Autolab PSTAT 204, Princeton Applied Research EG&G 273A oraz układ wirującej elektrody dyskowej z pierścieniem, spektrometr fotoelektryczny (Instytut Fotonowy), spektrofotometr UV/Vis/NIR Perkin Elmer Lambda 750S, reaktor UV (Instytut Fotonowy), napylarka próżniowa Quorum Q150T S, goniometr DataPhysics OCA25, oświetlacz solarny (Instytut Fotonowy)

Kontakt http://www.elektro.chemia.uj.edu.pl



Pracownia / Zespół **Laboratorium Fotolizy Laserowej i Szybkich Technik Kinetycznych**

Kierownik **prof. dr hab. Grażyna Stochel**

Badania Wyposażenie laboratorium pozwala nie tylko na charakteryzowanie związków chemicznych i półprzewodników pod kątem ich właściwości spektroskopowych, fotofizycznych i fotochemicznych, ale również badanie kinetyki i mechanizmów reakcji termicznych i fotochemicznych w roztworach w szerokim zakresie czasowym (do nanosekund), temperaturowym i ciśnieniowym (do 200MPa). Badania koncentrują się wokół reakcji katalitycznych i fotokatalitycznych o znaczeniu syntetycznym, biomedycznym oraz środowiskowym.

Aparatura Laser Nd:YAG, zestaw do laserowej fotolizy błyskowej, spektrofluorymetr Stopped Flow SX20 (Applied Photophysics) z detektorem diode array, spektrofluorymetr Stopped Flow SX20 (Applied Photophysics) z przystawką do pomiaru anizotropii fluorescencji, spektrofluorymetr Fluorolog 3 (Horiba) wraz z kriostatem helowym (ARS) termostatującym próbki w zakresie 5–350 K, spektrofotometr UV-Vis-NIR Lambda 950 (Perkin Elmer) z termostatującym układem Peltiera (0–110°C), układ do wysokociśnieniowych pomiarów spektroskopowych (stacjonarnych i czasowo-rozdzielczych) do 200 MPa

Kontakt **mgr Janusz Oszajca,** janusz.oszajca@uj.edu.pl; tel. 12 686 2505



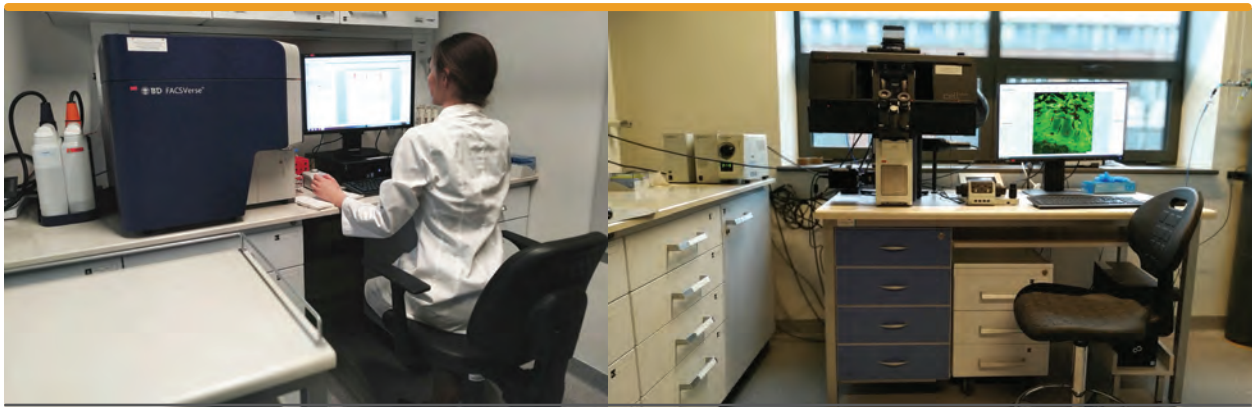
Pracownia / Zespół **Laboratorium Syntezy i Badań Związków Bioaktywnych i Biomateriałów**

Kierownik **prof. dr hab. Grażyna Stochel**

Badania Badania podstawowe w zakresie oceny cytotoksyczności związków chemicznych oraz nanomateriałów jako potencjalnych farmaceutyków dla zastosowań diagnostycznych i terapeutycznych. Badania mają na celu poznanie mechanizmów aktywności biologicznej (cytotoksyczność, lokalizacja wewnątrzkomórkowa, mechanizmy śmierci komórkowej) oraz wyjaśnienie wpływu na podstawowe procesy biochemiczne (aktywność enzymatyczna, replikacja DNA). Badania dotyczą także zjawiska oporności wielolekowej, doskonalenia stosowanych formulacji farmaceutycznych, jak również korzystania z najnowszych osiągnięć chemii materiałów i nanotechnologii na różnych etapach badań potencjalnych farmaceutyków.

Aparatura infrastruktura do prowadzenia hodowli komórkowych *in vitro* komory laminarne (Steril-BIO BAN), inkubatory (Heal Force HF90), dewar do przechowywania próbek w ciekłym azocie (BIOCANE 20, THERMO SCIENTIFIC), mikrowirówka laboratoryjna z chłodzeniem (THERMO SCIENTIFIC), wirówka uniwersalna z chłodzeniem (Sorvall ST16R, THERMO SCIENTIFIC), pionowy sterylizator parowy (NUVE), odwrócony mikroskop optyczny z zestawem do wizualizacji oraz przystawką do fluorescencji (Olympus IX51), spektrometr do odczytu mikropłytek (TECAN), cytometry przepływowe (BD FACS Verse, Gauva easyCyte)

Kontakt **dr hab. Małgorzata Brindell, prof. UJ,** brindell@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2500
dr hab. Agnieszka Kyzioł, prof. UJ, kyziol@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2484



Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Analitycznej Spektrometrii Atomowej**

Kierownik **dr Anna Telk**

Badania Przygotowanie próbek stałych do analizy pierwiastkowej (liofilizacja i mineralizacja mikrofalowa). Oznaczanie pierwiastków (metale i niektóre niemetale np. S, P) oraz analiza jakościowa/ półilościowa technikami jedno- i wielopierwiastkowymi (AFS, FAAS, GFAAS, ICP-OES, ICP-MS). Bezpośrednia analiza ciała stałego, tworzenie map dystrybucji pierwiastków na powierzchni obiektu lub ocena jednorodności materiału dzięki zastosowaniu techniki mikropróbkowania laserowego w połączeniu z techniką spektrometrii mas z jonizacją w plazmie sprzężonej indukcyjnie (LA-ICP-MS). Analiza specjacyjna (np. Cr(III)/Cr(VI)) z zastosowaniem połączenia spektrometru ICP-MS wraz z chromatografem cieczowym (HPLC).

Aparatura mineralizatory mikrofalowe (Magnum, ERTEC oraz Multiwave 3000, Anton Paar), liofilizator (FreeZone 1, Labconco), spektrometr AAS z atomizacją w płomieniu (PinAAcle 900F, PerkinElmer) lub elektrotermiczną (PinAAcle 900Z, PerkinElmer), spektrometr atomowej fluorescencji (AFS-8220, Titan), spektrometr ICP-MS z analizatorem kwadrupolowym (Elan DRC-e, PerkinElmer) lub czasu przelotu (OptiMass 9500, GBC), spektrometr ICP-OES (Optima 2100, PerkinElmer)

Kontakt **dr Anna Telk,** anna.telk@uj.edu.pl, tel. 12 686 2780



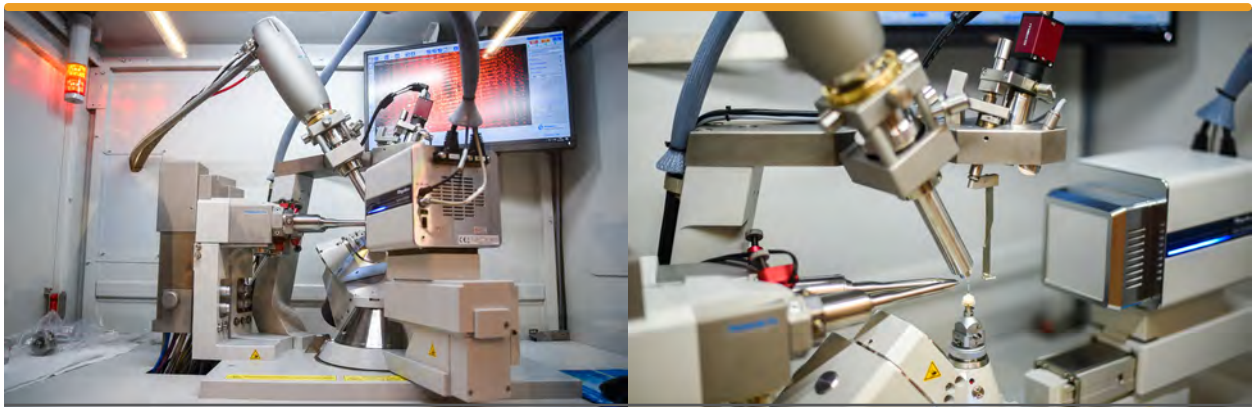
Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Badań Dyfrakcyjnych**

Kierownik **prof. dr hab. Krzysztof Lewiński**

Badania Wyposażenie pracowni umożliwia zbieranie danych dyfrakcyjnych o wysokiej jakości do celów rentgenowskiej analizy strukturalnej makrocząsteczek oraz związków małocząsteczkowych. Pomiary mogą być wykonywane w szerokim zakresie temperatur od -210°C do 130°C, co umożliwia badania strukturalnych przemian fazowych. Oprócz pomiarów standardowych możliwe są też niskotemperaturowe wysokorozdzielcze pomiary w celu wyznaczenia rozkładu gęstości elektronowej w krysztale oraz wykonywanie pomiarów w warunkach wysokiego ciśnienia.

Aparatura synergy-S, Rigaku Oxford Diffraction, dyfraktometr czterokołowy wyposażony w dwa źródła promieniowania rentgenowskiego PhotonJet Cu z regulacją wiązki oraz PhotonJet Mo, wydajny detektor HPC HyPix-6000HE, system chłodzenia próbki Cryostream 800 umożliwiający pomiary w zakresie temperatur -190–130°C, SuperNova, Oxford Diffraction, dyfraktometr czterokołowy wyposażony w dwa źródła promieniowania rentgenowskiego Cu i Mo, detektor CCD Atlas, system chłodzenia próbki CryojetHT umożliwiający pomiary w zakresie temperatur -180–220°C

Kontakt **dr Wojciech Nitek,** nitek@chemia.uj.edu.pl



Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Chemicznego Monitoringu Środowiska i Badań Środowiska Pracy**

Kierownik **dr hab. Andrzej Adamski, prof. UJ**

Badania Pracownia oferuje szereg analiz dotyczących chemicznego monitoringu środowiska oraz badań środowiska pracy. Badane są próbki powietrza zewnętrznego i wewnętrznego, wód i gleb na obecność zanieczyszczeń pochodzenia antropogenicznego, głównie pestycydów, metali ciężkich, lotnych związków organicznych (z uwzględnieniem WWA). Analizowane są także wybrane próbki biologiczne, np. miody i produkty pszczele na zawartość metali ciężkich i WWA. Istotny obszar aktywności Pracowni stanowią badania próbek powietrza wewnętrznego na obecność lotnych związków organicznych, próbki popiołów różnego pochodzenia oraz pyłów, w tym pyłów drogowych i przemysłowych. Dla materiałów tych oferowane są m.in. oznaczenia amoniaku, lotnych związków organicznych i metali ciężkich. Dodatkowo pracownia wykonuje standardowe badania fizykochemiczne wód: pH, twardość, przewodnictwo.

Aparatura chromatograf GC/FID, chromatograf GC/MS z dozownikiem headspace, chromatograf HPLC/MS, chromatograf HPLC/UV, chromatograf HPIC z detektorem konduktometrycznym, spektrometr FTIR Nicolet iS5 umożliwiający pomiary w modzie ATR, spektrometr UV/Vis, spektrometr DRIFT Bruker, spektrometr UV/Vis-DR Perkin-Elmer, spektrometr ASA, zestaw do badań fizykochemicznych i analiz składu wody

Kontakt **dr hab. Andrzej Adamski, prof. UJ,** adamski@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2574





Pracownia / Zespół **Pracownia Chemii Sądowej**

Kierownik **dr hab. Michał Woźniakiewicz, prof. UJ**

Badania Pomiary wysokorozdzielczych widm MS produktów syntezy chemicznej – potwierdzenie tożsamości produktu. Analiza roztworów pod kątem zawartości jonów (m.in. anionów organicznych i nieorganicznych) techniką elektroforezy kapilarnej. Analiza próbek biologicznych (krew, włosy) i próbek złożonych technikami elektroforezy kapilarnej sprzężonej ze spektrometrią mas (CE-MS) oraz wysokosprawnej chromatografii cieczowej sprzężonej z tandemową spektrometrią mas (LC-MS). Identyfikacja zanieczyszczeń w produktach syntezy chemicznej techniką LC-MS. Przygotowanie próbek do analizy technikami mineralizacji mikrofalowej oraz ekstrakcji wspomaganej mikrofalami.

Aparatura system do chromatografii cieczowej z tandemowym spektrometrem mas micro-Q-TOF-MS (Bruker), źródła jonów ESI, APCI, APPI, direct probe; spektrometr mas z analizatorem czasu przelotu microTOF (Bruker) z możliwością pomiaru masy z dokładnością do 5·10 4 Da; system do elektroforezy kapilarnej PA800 Plus (Beckman) z detektorem DAD, UV, lub LIF, mineralizator/ekstraktor mikrofalowy Mars5x (CEM)

Kontakt chemiasadowa@uj.edu.pl, www.forensic.chemia.uj.edu.pl



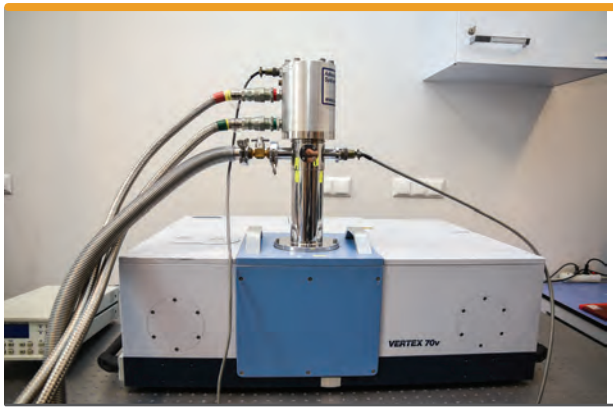
Pracownia / Zespół **Pracownia Ciekłych Kryształów**

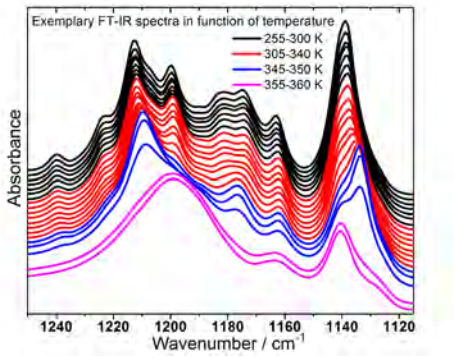
Kierownik **dr hab. Łukasz Hetmańczyk**

Badania Pomiary widm IR metodą transmisyjną próbek w postaci ciał stałych, cieczy oraz gazów w funkcji temperatury (-260–220°C)

Aparatura próżniowy spektrometr FT-IR Bruker Vertex 70V wyposażony w dwa detektory umożliwiające pomiary widm IR w zakresie bliskiej i środkowej (8000 – 400 cm^{-1}) oraz dalekiej (600 – 30 cm^{-1}) podczerwieni. Spektrometr zintegrowany jest z kriostatem, kompresorem helowym ARS i kontrolerem temperatury. Układ pracuje w cyklu zamkniętym i umożliwia pomiary temperaturowe widm próbek w ciele stałym w zakresie -260–220°C

Kontakt **dr hab. Łukasz Hetmańczyk,** hetmancz@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2387
dr hab. Joanna Hetmańczyk, serwonsk@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2431
dr hab. Elżbieta Szostak, szostak@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2454
dr Natalia Górska, gorska@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2400





Pracownia / Zespół **Pracownia Dyfraktometrii Proszkowej**

Kierownik **prof. dr hab. Wiesław Łasocha**

Badania Pomiary dyfrakcji promieni rentgenowskich na materiałach polikrystalicznych. Analiza fazowa mieszanin stałych. Identyfikacja odmian polimorficznych materiałów. Badania przemian fazowych w zależności od temperatury. Badania mikrodyfrakcyjne (punktowe) obiektów (w tym obiektów zabytkowych), pigmentów, metali, produktów korozji. Możliwe badania próbek higroskopijnych i łatwo utleniających się, w szerokim zakresie temperatur. Analiza struktury krystalicznej materiałów polikrystalicznych. Pomiary dyfrakcyjne do dokumentacji patentowej.

Aparatura dyfraktometr proszkowy PANalytical X'pert PRO MPD umożliwiający pomiary zarówno w geometrii refleksyjnej (Bragg-Brentano) jak i transmisyjnej (Debye-Scherrer). Wymienne podzespoły (komory Anton Paar, moduł Oxford Cryostream) zapewniają możliwość pomiarów w szerokim zakresie temperatur oraz w warunkach próżni

Kontakt **prof. dr hab. Wiesław Łasocha,** lasocha@chemia.uj.edu.pl
www.zsdp.chemia.uj.edu.pl/xraylab





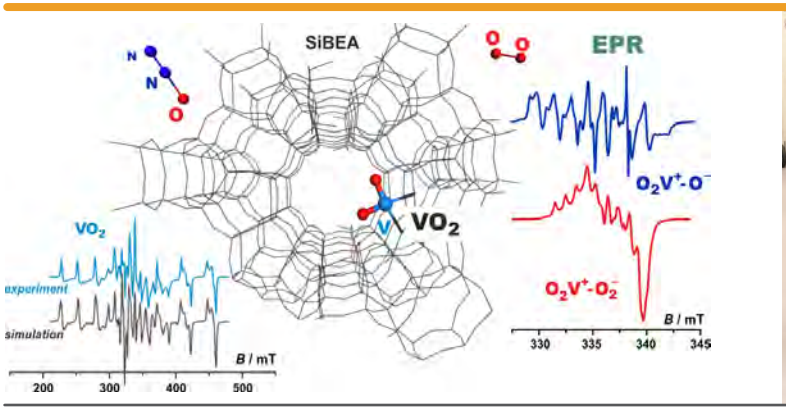
Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Elektronowego Rezonansu Paramagnetycznego**

Kierownik **prof. dr hab. Zbigniew Sojka**

Badania Pomiary techniką CW-EPR materiałów w postaci ciał stałych (proszki), roztworów lub zawiesin w zakresie temperatur od temperatury wrzenia ciekłego azotu do ok. 100°C z wykorzystaniem azotowej przystawki temperaturowej. Możliwe pomiary z wykorzystaniem sorpcji związków chemicznych w warunkach stacjonarnych i próbek poddanych wcześniejszemu traktowaniu w warunkach kontrolowanej temperatury oraz atmosfery i naświetlania promieniowaniem UV. Ze względu na specyfikę pomiaru FT-EPR, badania najczęściej możliwe są do wykonania tylko z zastosowaniem ciekłego helu.

Aparatura spektrometr fali ciągłej CW-EPR Elexsys 500 firmy Bruker pracujący w paśmie X oraz spektrometr impulsowy FT-EPR Elexsys-II E580 firmy Bruker pracujący w paśmie X z przystawkami temperaturowymi

Kontakt **dr hab. Ewa Bidzińska** bidzinsk@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2490 lub 2319
prof. dr hab. Zbigniew Sojka sojka@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2506 lub 2492





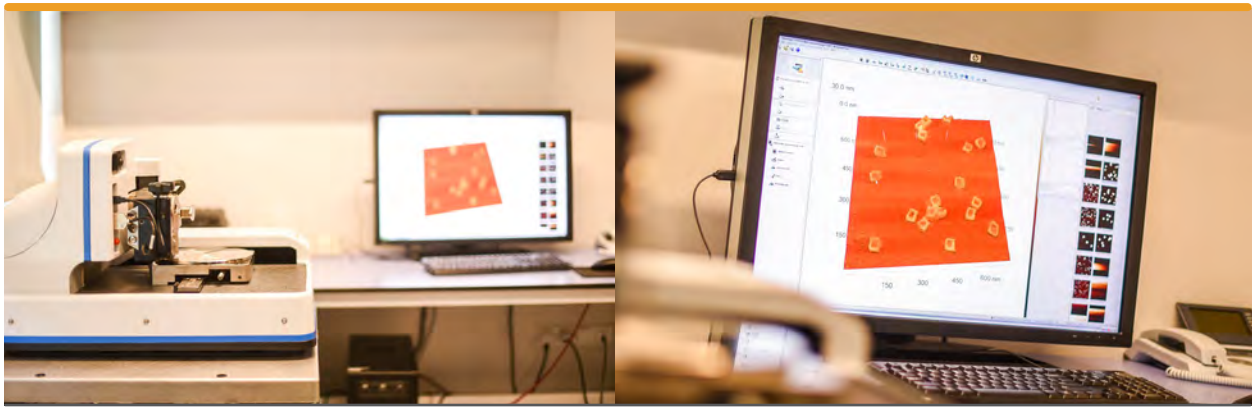
Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Mikroskopii Sił Atomowych**

Kierownik **prof. dr hab. Szczepan Zapotoczny**

Badania Zakres wykonywanych usług obejmuje m.in.:
- badania topografii powierzchni próbek stałych w powietrzu oraz w cieczy,
- badanie właściwości mechanicznych technikami nanoindentacji lub z wykorzystaniem trybu PeakForce QNM®,
- wykonywanie map przewodnictwa próbek przewodzących oraz półprzewodnikowych za pomocą przewodzącego mikroskopu sił atomowych (CAFM, ResiScope, PeakForce TUNA),
- charakterystyka próbek magnetycznych za pomocą mikroskopii sił magnetycznych (MFM),
- obrazowanie potencjału powierzchniowego za pomocą mikroskopii wykorzystującej sondę Kelvina.

Aparatura mikroskop AFM Dimenson ICON (Bruker) pracujący w trybach: PeakFroce QNM, ScanAsysts, PeakForce TUNA, CAFM, tapping, MFM, EFM oraz kontaktowym, mikroskop AFM Nano-Observer (CSInstruments) pracujący w trybach: kontaktowym, tappingu, ResiScope, Soft ResiScope oraz wykorzystującym sondę Kelvina

Kontakt **prof. dr hab. Szczepan Zapotoczny,** zapotocz@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2530,
dr Karol Wolski, wolski@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2528
http://www.nfpm.chemia.uj.edu.pl



Pracownia / Zespół **Pracownia Skaningowej Mikroskopii Elektronowej**

Kierownik **prof. dr hab. Wojciech Macyk**

Badania Skaningowy mikroskop elektronowy umożliwia obrazowanie materiałów z rozdzielczością sięgającą 2 nm. Pojemna komora mikroskopu pozwala na obrazowanie oraz analizę dużych próbek zarówno nieorganicznych jak i biologicznych, a dedykowany stolik Peltiera umożliwia zamrożenie próbki w trakcie pomiaru (-60°C). Detektory SE oraz BSE pozwalają na badania topografii próbek oraz rozróżnienie obszarów próbki o różnym składzie pierwiastkowym. Specjalna przystawka STEM pozwala na pracę mikroskopu w trybie transmisyjnym. Ponadto detektor LVSTD pozwala na pomiary w niskiej próżni (tryb środowiskowy). Mikroskop wyposażony jest również w detektor EDS umożliwiający analizę pierwiastkową badanych materiałów oraz tworzenie map ich dystrybucji. Ponadto, pracownia wyposażona jest w napylarkę pozwalającą na pokrycie próbek nieprzewodzących nanometryczną warstwą złota bądź innych metali.

Aparatura - mikroskop elektronowy TESCAN VEGA 3 LM z działem LaB_6 wyposażony w detektory SE, BSE, LVSTD (tryb niskiej próżni), STEM oraz EDS (Oxford Instruments), napylarka Quorum Q150R do nanoszenia cienkich warstw złota oraz innych metali na badane próbki
- pracownia przygotowuje się do zakupu wysokiej klasy mikroskopu wyposażonego w kolumnę elektronową i jonową (FIB) oraz zaawansowane detektory SE, BSE, STEM, EDS, a także TOF-SIMS.

Kontakt **dr inż. Michał Pacia,** pacia@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2485



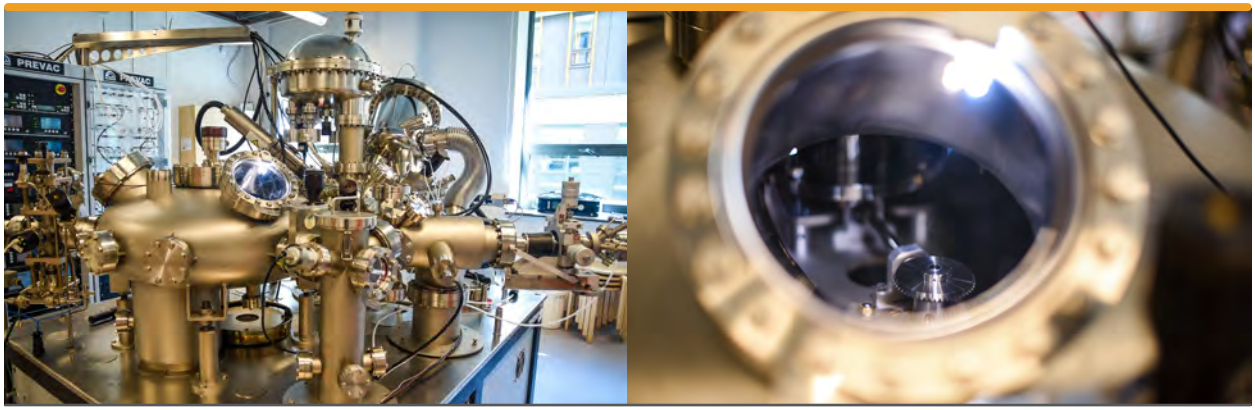
Pracownia / Zespół **Pracownia Spektroskopii Fotoelektronów**

Kierownik **prof. dr hab. Piotr Kuśtrowski**

Badania Rentgenowska spektroskopia fotoelektronowa (XPS) jest techniką przeznaczoną do badania składu chemicznego powierzchni materiałów stałych, dostarczającą informacji o warstwach powierzchniowych lub strukturach cienkowarstwowych. Metoda XPS jest szczególnie cenna w dziedzinie katalizy, inżynierii materiałowej, badaniach korozyjnych czy elektrochemii. Szeroki wybór dostępnych uchwytów do próbek umożliwia badanie preparatów w formie drutów, blaszek, granulek jak i proszków. Przed właściwym pomiarem możliwa jest aktywacja termiczna preparatu w komorze preparacyjnej, bądź chemiczna w wysokociśnieniowym reaktorze przepływowym, umożliwiającym pracę z zastosowaniem różnych gazów reakcyjnych pod ciśnieniem do 1.6 MPa oraz do temperatury 640°C, z analizą gazowych produktów w kwadrupolowym spektrometrze masowym.

Aparatura aparatura firmy PREVAC do badań powierzchni ciał stałych litych i proszkowych w warunkach ultra wysokiej próżni wyposażona w hemisferyczny analizator cząstek naładowanych (VG SCIENTA R3000), lampę rentgenowską dwuantykatodową Mg/Al z monochromatorem, działo jonowe do wykonywania profili głębokościowych (IS 40E1) oraz działo elektronowe do spektroskopii Augera (ES 40C1)

Kontakt **prof. dr hab. Piotr Kuśtrowski,** piotr.kustrowski@uj.edu.pl, tel: 12 686 2415
https://zto.chemia.uj.edu.pl/pracownia-xps



Pracownia / Zespół **Pracownia Spektroskopii Magnetycznego Rezonansu Jądrowego**

Kierownik **dr Bogdan Musielak**

Badania Spektrometry NMR (600 i 300 MHz) są doskonałymi narzędziami do badań analitycznych i pozwalają na przeprowadzenie szerokiej gamy eksperymentów NMR, w tym wielojądrowych (2D) czy w różnych temperaturach (VT). Aparat 600 MHz posiada kriosondę zwiększającą czułość pomiaru, dzięki czemu możliwe jest rejestrowanie widm dla próbek o niskich stężeniach lub w krótszym czasie. Dzięki wysokiej czułości idealnie nadaje się do badań w biologii strukturalnej, badań przesiewowych w poszukiwaniu nowych leków, materiałów i małocząsteczkowych związków organicznych.

Aparatura spektrometer Bruker 600 MHz Avance III – używany do pomiarów NMR biomolekuł i małocząsteczkowych związków, badań przesiewowych
akcesoria:
– 5 mm TCI (^{1}H, ^{13}C, ^{15}N, ^{19}F) kriosonda z z-gradientem
– temperatura pracy: 20–80°C
spektrometer Bruker 300 MHz Avance II – używany do rutynowych pomiarów NMR
akcesoria:
– 5 mm BBO (^{1}H, ^{11}B, ^{13}C, ^{15}N, ^{19}F, ^{31}P) sonda z z-gradientem
– temperatura pracy: 20–150°C

Kontakt **dr Bogdan Musielak,** musielak@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2441



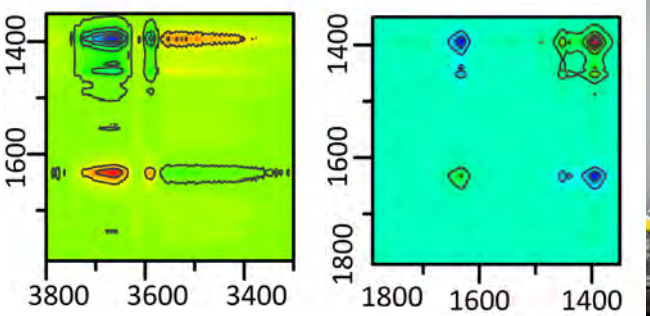
Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Spektroskopii w Podczerwieni**

Kierownik **prof. dr hab. Kinga Góra-Marek**

Badania Pomiary transmisyjne techniką FT-IR materiałów w postaci ciał stałych (filmy, proszki), roztworów lub zawiesin (w kuwetach do cieczy) oraz czasowo-rozdzielcze pomiary *in-situ* i *operando* z wykorzystaniem sorpcji związków chemicznych prowadzone w warunkach kontrolowanej temperatury oraz atmosfery, w warunkach stacjonarnych oraz przepływowych. Ekstrakcja wysokociśnieniowa próbek stałych z użyciem rozpuszczalników (15 bar, do 100^{0}C).

Aparatura spektrometry FT-IR firmy Bruker (Equinox 55, Vertex 70) pracujące w zakresie 4 000–400 cm^{-1} (zakres średniej podczerwieni), z rozdzielczością 1–4 cm^{-1}, wyposażone w detektory MCT oraz DTGS, jak również w zestaw kuwet umożliwiających pomiary techniką transmisyjną cieczy i ciał stałych, ekstraktor wysokociśnieniowy Dionex ASE 350 (ThermoFisher)

Kontakt **dr inż. Karolina Tarach,** karolina.tarach@uj.edu.pl
prof. dr hab. Kinga Góra-Marek gorak@chemia.uj.edu.pl
https://zeochem.chemia.uj.edu.pl/





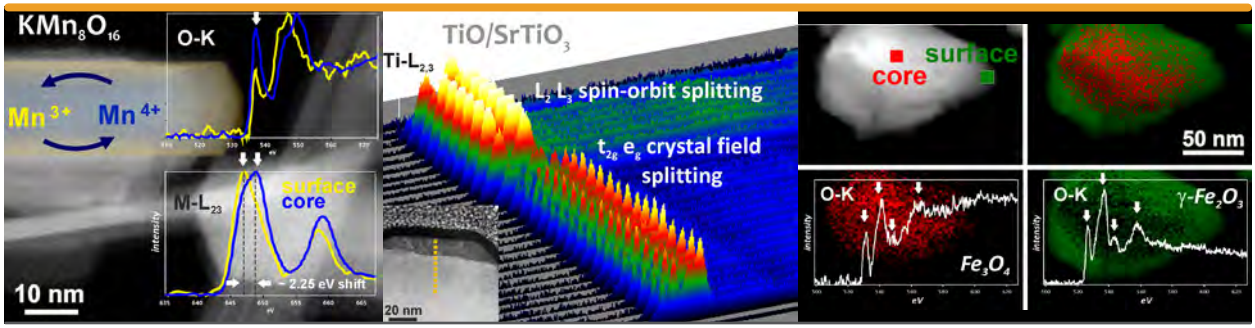
Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Transmisyjnej Mikroskopii Elektronowej**

Kierownik **prof. dr hab. Zbigniew Sojka**

Badania Oferujemy pełny zakres badań i metod klasycznej transmisyjnej mikroskopii elektronowej: obrazowanie mikrostruktury materiałów (w skali atomowej, nano oraz mikro), w trybach klasycznych TEM i HRTEM z rozdzielczością punktową 0,25 nm oraz w trybie skaningowym STEM z rozdzielczością < 0,18 nm; analizę fazową materiałów w oparciu o techniki dyfrakcji elektronowej; ultraszybką analizę lokalnego składu chemicznego i rozmieszczenia pierwiastków w oparciu o metodę EDX (STEM-EDX) z wysoką przestrzenną zdolnością rozdzielczą; lokalną identyfikację specjacji chemicznej pierwiastków metodą spektroskopii strat energii elektronów (EELS < 1.0 eV) z rozdzielczością nanometryczną (mapy rozmieszczenia pierwiastków/specjacji chemicznej techniką STEM-EELS); obrazowanie mikrostruktury z kontrastem chemicznym z wykorzystaniem filtra energii GIF (EFTEM); obrazowanie 3D mikrostruktury oraz składu pierwiastkowego metodą tomografii elektronowej.

Aparatura analityczny wysokorozdzielczy transmisyjny mikroskop elektronowy FEI Tecnai Osiris 200 kV, działo z emisją polową X-FEG z emiterem Schottky'ego, zakres energii elektronów: 80 – 200 keV, detektor SDD Super-X EDX czterosektorowy (windowless), spektrometr promieniowania rentgenowskiego z dyspersją energii EDX (≤130 eV) i systemem mikroanalizy Esprit (Bruker), filtr energii kinetycznej elektronów GIF (Gatan), spektrometr strat energii elektronów EELS Quantum (≤1 eV), dwie kamery wysokorozdzielcze CCD: Ultrascan i Orius (Gatan), detektor STEM – HAADF (Fischione 3000), holder analityczny, dwupochyłowy (Double-Tilt), holder tomograficzny (±75°)

Kontakt **prof. dr hab. Zbigniew Sojka,** sojka@chemia.uj.edu.pl
dr Joanna Gryboś, grybosjo@chemia.uj.edu.pl
dr inż. Michał Pacia, pacia@chemia.uj.edu.pl
https://tem.chemia.uj.edu.pl/



Pracownia / Zespół **Zespół Biologii Chemicznej i Projektowania Leków**

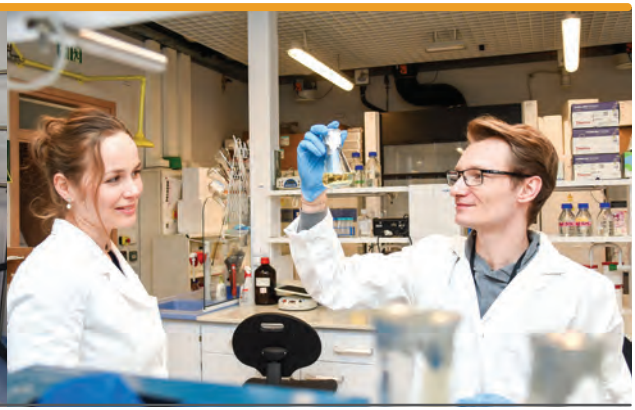
Kierownik **p.o. dr Łukasz Skalniak**

Badania Możliwość ekspresji, oczyszczania preparatu białkowego. Krystalizacja oczyszczonego, bądź dostarczonego preparatu białkowego.
Kokrystalizacja kompleksu białko-inhibitor lub nasączanie inhibitorami kryształów białkowych.
Rozwiązanie struktury krystalograficznej białka, kompleksu białko:związek.
Analiza aktywności dostarczonego potencjalnego chemoterapeutyka względem wybranych dostępnych linii komórkowych:
– analiza żywotności komórek w odpowiedzi na zastosowany związek – test MTT,
– analiza poziomu ekspresji wybranych genów w odpowiedzi na badany chemoterapeutyk przy pomocy techniki Western Blot lub cytometrii przepływowej.

Aparatura system do oczyszczania białek: Äkta pure, GE Healthcare, inkubator z kontrolą CO_2: New Brunswick, Galaxy 170 R, Eppendorf, wirówka wysokich prędkości: Avanti JXN-26, Beckman Coulter, komora Laminarna, BioTectum

Kontakt **dr Łukasz Skalniak,** lukasz.skalniak@uj.edu.pl





Pracownia / Zespół **Zespół Chemii Związków Heterocyklicznych i Metaloorganicznych**

Kierownik **dr hab. Dariusz Cież**

Badania Spektrometr dichroizmu kołowego umożliwia wyznaczanie absolutnej konfiguracji centrów stereogenicznych w optycznie aktywnych związkach chemicznych, monitorowanie przebiegu procesów stereoselektywnych oraz badania konformacyjne chiralnych układów (peptydów, białek, optycznie aktywnych związków naturalnych i syntetycznych). Uzupełnieniem powyższego zestawu pomiarowego jest cyfrowy polarymetr pozwalający na precyzyjne wyznaczanie kąta skręcalności optycznej enancjomerycznie czystych związków lub wyznaczanie nadmiarów enancjomerycznych połączeń o znanej skręcalności właściwej i wzbogaconych w jeden enancjomer.

Aparatura spektrometr dichroizmu kołowego o zakresie spektralnym 163–900 nm, zaopatrzony w uchwyt Peltiera pozwalający na wykonywanie pomiarów CD oraz FDCD w temperaturach od -10 do 110°C, termostatowaną łaźnię Julabo F25-HE oraz samodzielny cyfrowy polarymetr P-2000-Na stanowiący uzupełnienie powyższego zestawu pomiarowego

Kontakt **dr hab. Dariusz Cież,** dariusz.ciez@uj.edu.pl,
http://www2.chemia.uj.edu.pl/~trzewik/



Pracownia / Zespół **Zakład Fizykochemicznych Badań Środowiskowych**

Kierownik **dr hab. Katarzyna Hąc-Wydro, prof. UJ**

Badania Badania materiałów tworzących monowarstwy Langmuira na granicy faz roztwór wodny/powietrze. Pomiar izoterm ciśnienia powierzchniowego (π-A), potencjału powierzchniowego (ΔV-A). Transfer monowarstw na stałe podłoża techniką LB. Badania wpływu substancji rozpuszczonych w subfazie lub wstrzykniętych do subfazy (ksenobiotyki, zanieczyszczenia środowiskowe, enzymy) pod monowarstwę o odpowiednim uporządkowaniu na właściwości fizyczne modelowej membrany. Badania spektroskopowe *in situ* monowarstw Langmuira – spektroskopia PM-IRRAS. Badania surfaktantów w roztworach wodnych – wyznaczanie cmc, przewodnictwa i innych parametrów fizykochemicznych. Oznaczanie wybranych fizykochemicznych i chemicznych wskaźników jakości wód i gleb.

Aparatura wagi Langmuira KSV NIMA KN 2002, czujnik potencjału powierzchniowego KSV SPOT, spektrometr PM-IRRAS KSV 550, diper do depozycji warstw LB, chromatograf HPLC z detekcją MS, spektrofotometry UV-vis, spektrometr ASA

Kontakt **dr hab. Katarzyna Hąc-Wydro, prof. UJ,** hac@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2572
dr hab. Marcin Broniatowski, prof. UJ, broniato@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2570
http://www2.chemia.uj.edu.pl/zchs/physchem.php?lang=pl





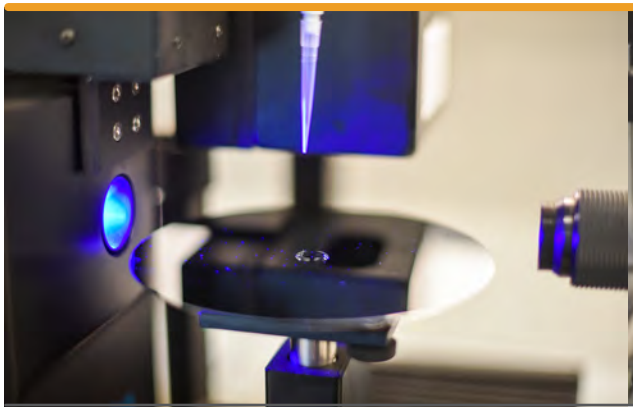
Pracownia / Zespół **Zespół Fizykochemii Powierzchni**

Kierownik **dr hab. Paweł Wydro, prof. UJ**

Badania Badanie właściwości mechanicznych i elektrycznych monowarstw Langmuira tworzonych na granicy faz roztwór wodny/powietrze (pomiary ciśnienia powierzchniowego i potencjału powierzchniowego w trakcie kompresji filmu powierzchniowego). Analiza morfologii monowarstw *in situ*. Pomiary napięcia powierzchniowego wodnych roztworów surfaktantów. Tworzenie i charakterystyka filmów Langmuir-Blodgett i Langmuir-Schaefer. Badanie zwilżania powierzchni ciała stałego przez ciecz (pomiary kąta zwilżania). Badanie właściwości dwuwarstw lipidowych (liposomów).

Aparatura powierzchniowa waga Langmuira firmy KSV Nima, wyposażona w zestaw do osadzania filmów Langmuir-Blodgett i Langmuir-Schaefer oraz elektrodę do pomiaru potencjału powierzchniowego metodą drgającego kondensatora, mikroskop kąta Brewstera firmy Accurion (Nanofilm_UltraBAM), tensjometr optyczny THETA T200 (Attension-Biolin Scientific), spektrofluorymetr (Hitachi F7100), spektrofotometr UV-Vis (Hitachi 2900)

Kontakt **dr hab. Paweł Wydro, prof. UJ,** wydro@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2519
dr hab. Beata Korchowiec, prof. UJ, bkorch@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2516





Pracownia / Zespół **Zespół Fizykochemii Zjawisk Międzyfazowych**

Kierownik **prof. dr hab. Patrycja Dynarowicz-Łątka**

Badania Synteza nowych surfaktantów, jak również nietypowych związków powierzchniowo aktywnych o szerokim spektrum zastosowania. Wytwarzanie cienkich warstewek powierzchniowych bazujących na materiałach funkcjonalnych o ściśle określonej grubości i pożądanej jakości, zarówno na powierzchni cieczy jak i ciała stałego. Eksperymentalne i teoretyczne modelowanie dwuwymiarowych błon biologicznych techniką Langmuira oraz badanie wpływu substancji bioaktywnych na właściwości biofizyczne błon; weryfikacja modeli na układach biologicznych. Wyznaczanie oddziaływań lek-błona w aspekcie badania mechanizmu działania leków, wyjaśnienia ich toksyczności oraz identyfikacji celów molekularnych na powierzchni błony. Badanie kinetyczne ureazy w formie natywnej i immobilizowanej, jak również badania strukturalnego chitozanu oraz jego wpływu na filmy lipidowe.

Aparatura waga Langmuira (KSV-Nima) wraz z mikroskopem kąta Brewstera (BAM) służącym do obrazowania morfologii utworzonych filmów powierzchniowych, wagi Langmuira-Blodgett (NIMA) do wytwarzania jedno- oraz wielowarstwowych filmów, przy użyciu metody wertykalnej (LB) oraz horyzontalnej (LS), dodatkowo wyposażone w elektrodę do pomiaru potencjału powierzchniowego, spektrofotometr UV-Vis i FTIR

Kontakt www2.chemia.uj.edu.pl/zfzm/



Pracownia / Zespół **Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych**

Kierownik **dr hab. Dawid Pinkowicz, prof. UJ**

Badania Badania właściwości magnetycznych: podatność magnetyczna DC i AC, pomiary efektu fotomagnetycznego, pomiary magnetyczne pod ciśnieniem. Badanie właściwości fotoluminescencyjnych i pomiary czasów życia próbek ciekłych i stałych w zakresie 10-470 K. Badania strukturalne monokryształów w zakresie 80-500 K oraz pod wpływem promieniowania widzialnego. Badania dyfrakcyjne substancji polikrystalicznych, w tym wrażliwych na wilgoć i tlen. Mapowanie IR próbek stałych. Badania właściwości di- i ferroelektrycznych próbek stałych. Syntezy związków wrażliwych na powietrze atmosferyczne.

Aparatura magnetometr MPMS3 (QuantumDesign), dyfraktometry rentgenowskie (Bruker): monokrystaliczny (D8 Quest) i proszkowy (D8 Advance), spektrofluorymetr UV-Vis-NIR (FS-5, Edinburgh Instr.), spektrofotometr (UV-3600i Plus, Shimadzu), kriostat optyczny (ARS CS204-FMX-1SS), mikroskop IR (Nicolet iN10, Thermo Scientific), spektrometr dielektryczny (Concept 11, Novocontrol), tester ferroelektryczny (Precision Premier II, Radiant), System oczyszczania rozpuszczalników (PureSolv EN, Inert)

Kontakt **dr hab. Robert Podgajny, prof. UJ,** robert.podgajny@uj.edu.pl
dr hab. Dawid Pinkowicz, prof. UJ, dawid.pinkowicz@uj.edu.pl
dr hab. Szymon Chorąży, simon.chorazy@uj.edu.pl
dr Mateusz Reczyński, mateusz.reczynski@uj.edu.pl
https://znmm.chemia.uj.edu.pl/



Pracownia / Zespół **Zespół Obrazowania Ramanowskiego**

Kierownik **prof. dr hab. Małgorzata Barańska**

Badania Analizy spektroskopowe z zastosowaniem spektroskopii i mikroskopii ramanowskiej i w podczerwieni, spektroskopii absorpcyjnej UV-vis, wibracyjnego dichroizmu kołowego:
– analizy struktury i dystrybucji komponentów w farmaceutykach, np. określenie dystrybucji i rozmiaru ziaren substancji czynnych (API) w tabletkach leków,
– analizy struktury i dystrybucji komponentów w tkankach i komórkach, np. analiza zmian chemicznych w komórkach pod wpływem czynników aktywujących/inhibitorów, analiza zmian chemicznych w tkankach pod wpływem rozwoju patologii,
– korelacyjnej analizy dystrybucji związków w próbce i topografii powierzchni,
– analizy składu/dystrybucji komponentów w dziełach sztuki i artefaktach archeologicznych np. analiza składu i dystrybucji pigmentów, spoiw, produktów degradacji w warstwach malarskich,
– badania struktury molekularnej związków (API, metabolitów, biopolimerów) w materiałach biologicznych, np. badanie polimorfizmu leków,
– określanie konfiguracji absolutnej oraz nadmiaru enancjomerycznego.

Aparatura mikroskopy ramanowskie: Witec Alpha300 (532, 633 nm) z modułem AFM i FT MultiRam Bruker (1064 nm), spektrometr FT-IR Agilent 670-IR z mikroskopem 620-IR, spektrometr UV/Vis PerkinElmer Lambda 25, spektrometr VCD ChiralIR2X™ Biotools we współpracy z JCET, UJ: mikroskop ramanowski Witec Alpha300 (355, 488, 532, 633, 785 nm) z modułem AFM i SNOM, przenośny układ ramanowski Witec AlphaCard, spektrometr FT-IR ALPHA Bruker, spektrometr ROA ChiralRAMAN2X™ BioTools

Kontakt **prof. dr hab. Małgorzata Barańska,** m.baranska@uj.edu.pl, tel. 12 686 2389
http://www2.chemia.uj.edu.pl/zor/index.php



Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Spektrometrii Ramana**

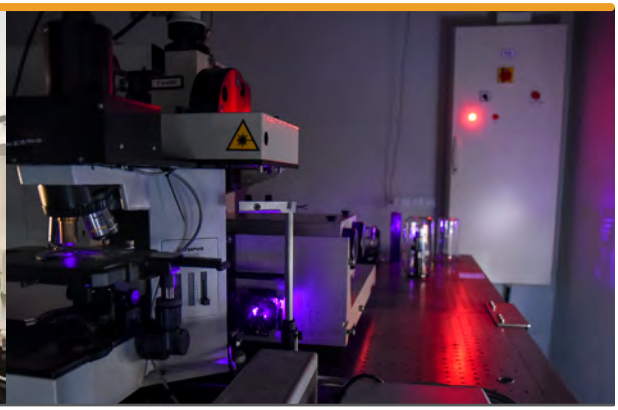
Kierownik **prof. dr hab. Aleksandra Wesełucha-Birczyńska**

Badania Pomiary metodą spektroskopii ramanowskiej z zastosowaniem techniki fourierowskiej lub dyspersyjnej. Badania wykonywane są na wszelkiego rodzaju próbkach homo- i heterogenicznych, które występują w fazie ciekłej lub stałej (np. materiały biologiczne, nanomateriały, polimery, materiały węglowe, artefakty archeologiczne, próbki geologiczne) w mikro i makro skali. Dzięki zmotoryzowanym stolikom mikroskopowym możliwe jest badanie zarówno powierzchni materiałów, tzw. mapowanie próbek, jak i profilowania wgłębnego. Istnieje również możliwość wykonania pomiarów rezonansowych. Możliwe jest też wykonanie pomiarów temperaturowych (-150 – 30°).

Aparatura spektrometr FT-Ramana Thermo Scientific, detektor InGaAs, linia wzbudzająca 1064 nm generowana przez laser Nd: YAG, spektrometr Ramana Renishaw inVia wyposażony w detektor CCD RenCAM i lasery: He-Cd Kimmon (442 nm), Ar+ (514.5 nm), diodowy HPNIR (785 nm), spektrometr T64000 Horiba Jobin Yvon z detektorem CCD i laserami kryptonowymi: 457 nm, 413 nm oraz laserem argonowym z linią 514.5 nm

Kontakt **prof. dr hab. Aleksandra Wesełucha-Birczyńska**
birczyns@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2772
mgr Paulina Moskal, moskal@ chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2581
mgr Martyna Kraińska, krainska@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2581





Pracownia / Zespół **Zespół Technologii Organicznej**

Kierownik **prof. dr hab. Piotr Kuśtrowski**

Badania Zespół Technologii Organicznej dysponuje podstawową oraz zaawansowaną aparaturą do syntezy i charakterystyki fizykochemicznej różnorodnych materiałów porowatych i funkcjonalnych. W ramach badań wykonywane są:

- analizy struktury krystalicznej i składu fazowego materiałów metodą dyfraktometrii rentgenowskiej,
- badania struktury chemicznej technikami FT-IR i DRS UV-vis dla próbek w postaci proszków, cienkich filmów oraz lepkich cieczy,
- analizy składu pierwiastkowego próbek stałych metodami spektrometrii XRF oraz analizy elementarnej CHN,
- pomiary metodami analizy termicznej dla materiałów nieorganicznych, organicznych i kompozytowych,
- wyznaczanie parametrów teksturalnych materiałów porowatych metodą niskotemperaturowej adsorpcji N_2,
- badania aktywności katalitycznej materiałów w różnych procesach z użyciem mikroreaktorów zbiornikowych i przepływowych.

Aparatura sorptomaty ASAP 2010 i ASAP 2020 (Micromeritics), dyfraktometr rentgenowski Phaser D2 (Bruker), termograwimetr SDT Q600 (TA Instruments), spektrometry FT-IR (Nicolet 6700), UV-vis-DRS (Evolution 220) oraz EDXRF (ARL QUANT'X), analizator elementarny CHN Flash 2000 (Thermo Scientific), układy do badań aktywności katalitycznej oraz do pomiarów technikami temperaturowo-programowanymi (TPR, TPD, TPOx)

Kontakt **prof. dr hab. Piotr Kuśtrowski,** piotr.kustrowski@uj.edu.pl, tel: 12 686 2415
https://zto.chemia.uj.edu.pl/sorptomaty-asap





Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Wysokorozdzielczej Spektrometrii Masowej**

Kierownik **prof. dr hab. Wojciech Piekoszewski**

Badania Analiza proteomiczna nanoLC-MALDI zróżnicowanych materiałów biologicznych. analizy pierwiastkowe materiałów biologicznych: krwi, moczu, osocza, tkanek pod kątem określenia wpływu wybranych metali na funkcje życiowe lub ich znaczenia toksykologicznego czy patologicznego. Bezpośrednia analiza próbek archeologicznych (zęby i kości). Tworzenie map dystrybucji pierwiastków.

Aparatura spektrometr MALDI połączony z nanoLC (Bruker)

Kontakt **mgr Joanna Kasprzyk,** kasprzykj@chemia.uj.edu.pl, 12 686 25 80



Pracownia / Zespół **Grupa Spektroskopii Chiraloptycznej**

Kierownik **dr hab. Agnieszka Kaczor, prof. UJ**

Badania Metodami chiraloooptycznymi, w szczególności Ramanowskiej Aktywności Optycznej (ROA) i Wibracyjnego Dichroizmu Kołowego (VCD) badamy:
– indukcję chiralności w supramolekularnych agregatach i układach naturalnych,
– wzmocnienie sygnału ROA/VCD np. przez agregację,
– sondy chiraloptyczne,
– strukturę molekularną chiralnych biocząsteczek.
Ponadto zainteresowania naukowe Grupy oscylują także wokół badania okołonaczyniowej tkanki tłuszczowej i jej roli w patologiach układu krwionośnego oraz patogenezy molekularnej HPV i raka szyjki macicy.

Aparatura spektrometr VCD ChiralIR2X™ Biotools. W 2021 planowany zakup spektrometrów ROA ChiralRAMAN2X™ BioTools i ECD Jasco J-1500/BU. We współpracy z JCET UJ: spektrometr ROA ChiralRAMAN2X™ BioTools, mikroskop ramanowski Witec Alpha300 z modułem AFM i SNOM, przenośny układ ramanowski Witec AlphaCard, spektrometr FT-IR ALPHA Bruker, SORS (Spatially Offset Raman Spectroscopy) Resolve Agilent Technologies

Kontakt **dr hab. Agnieszka Kaczor, prof. UJ,** agnieszka.kaczor@uj.edu.pl, tel. +48 12 686 2396
www.chiropt.eu



Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Analiz Termicznych i Kalorymetrii**

Kierownik **dr hab. Dorota Majda**

Badania Zakres wykonywanych usług obejmuje m. in. badania:
- przemian fazowych i reakcji chemicznych zachodzących w ciałach stałych pod wpływem zmian temperatury (procesy rozkładu termicznego i desorpcji, reakcje ciało stałe – gaz i ciało stałe – ciało stałe, procesy aktywacji i deaktywacji katalizatorów);
- produktów gazowych powstających w czasie rozkładu ciał stałych;
- zawartości wilgoci, substancji lotnych, popiołu i wypełniaczy w tworzywach sztucznych czy rozpuszczalnika w preparatach organicznych (np. w farmaceutykach);
- efektów cieplnych zachodzących w próbce w czasie jej ogrzewania lub chłodzenia (wyznaczanie entalpii przemiany oraz ciepła właściwego);
- właściwości polimerów (identyfikacja, oznaczanie temperatur zeszklenia /Tg/, krystalizacji i topnienia);
- porowatości ciał stałych przy zastosowaniu termoporometrii (TMP) wody oraz sond organicznych;
- gęstości ciał stałych i cieczy.

Aparatura termograwimetr TGA/SDTA 851e (Mettler Toledo) pracujący w zakresie 25–1450°C sprzężony z kwadrupolowym spektrometrem masowym Thermostar GSD 300 T (Balzers); różnicowe kalorymetry skaningowe (Mettler Toledo): DSC 821e pracujący w zakresie (-50) -600°C oraz DSC 822e chłodzony ciekłym azotem, pracujący w zakresie (-140)–400°C; Mikrowaga analityczna AG 135 (Mettler Toledo) o dokładności 0,01 mg.

Kontakt **dr hab. Dorota Majda,** majda@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2337

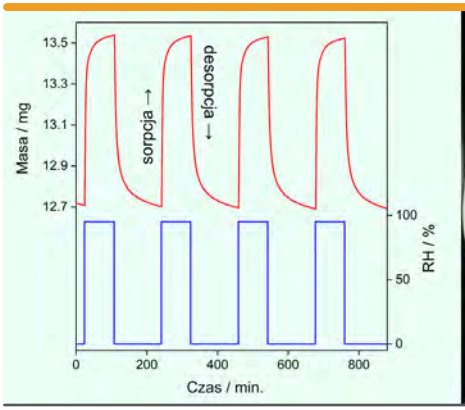
Pracownia / Zespół **Zespół Badań Materiałów Roślinnych**

Kierownik **dr hab. Magdalena Kurdziel**

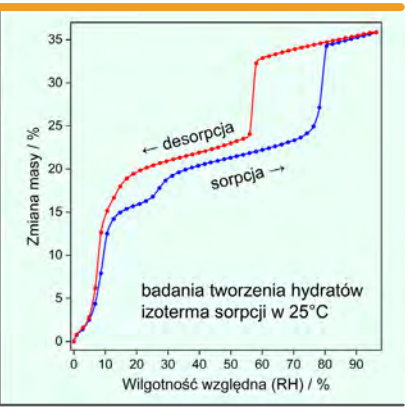
Badania Oferujemy badania procesów sorpcji/desorpcji pary wodnej oraz par lotnych rozpuszczalników organicznych metodą grawimetryczną w warunkach rzeczywistego ciśnienia parcjalnego w przepływie gazu nośnego. Technika może być stosowana do charakterystyki substancji krystalicznych, amorficznych, polimerów, kompozytów i układów wielofazowych, w tym farmaceutyków, żywności, materiałów budowlanych, drewna i produktów celulozowych.
Możliwe zastosowania obejmują badanie:
- przebiegu procesów suszenia / odwadniania / desolwatacji;
- tworzenia hydratów i solwatów;
- sorpcji par w materiałach porowatych;
- higroskopijności;
- zmian morfologicznych / zbrylania / degradacji pod wpływem zmian wilgotności i temperatury.

Aparatura aparat Dynamic Vapour Sorption DVS Resolution firmy Surface Measurement Systems do zaawansowanych badań sorpcji par. Możliwe jest badanie próbek o masie 1–1000 mg z dokładnością pomiaru masy 0,1 µg; wyznaczanie izoterm sorpcji pary wodnej w zakresie temperatur 10–60°C i RH 0–98%, oraz par rozpuszczalników organicznych w zakresie 10–50°C i $p/p0$ 0–90%

Kontakt **dr hab. Beata Nowicka,** beata.nowicka@uj.edu.pl, http://www.zbmr.chemia.uj.edu.pl







Pracownia / Zespół **Wydziałowa Pracownia Badań nad Trwałością i Degradacją Papieru**

Kierownik **dr hab. Krzysztof Kruczała, prof. UJ**

Badania Badania degradacji polimerów naturalnych i syntetycznych oraz sposobów zapobiegania tym procesom, opracowywanie nowoczesnych technik analiz fizykochemicznych materiałów stosowanych w obiektach muzealnych (papier, polimery, farby, werniksy itp.)
badania te obejmują m.in.:
- zmiany barwy,
- zmiany hydrofilowości / hydrofobowości powierzchni,
- identyfikację małocząsteczkowych lotnych związków organicznych uwalnianych podczas degradacji termicznej i fotodegradacji.

Aparatura chromatograf gazowy z układem termodesorpcyjnym i spektrometrem masowym, komora badan klimatycznych, spektrofotometr UV-Vis, spektrofotometr do pomiaru barwy, aparat do badan wytrzymałości materiałów, tester wytrzymałości papieru, zrywarka do papieru, tester przedzierania papieru

Kontakt **dr hab. Krzysztof Kruczała, prof. UJ,** kruczala@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2498



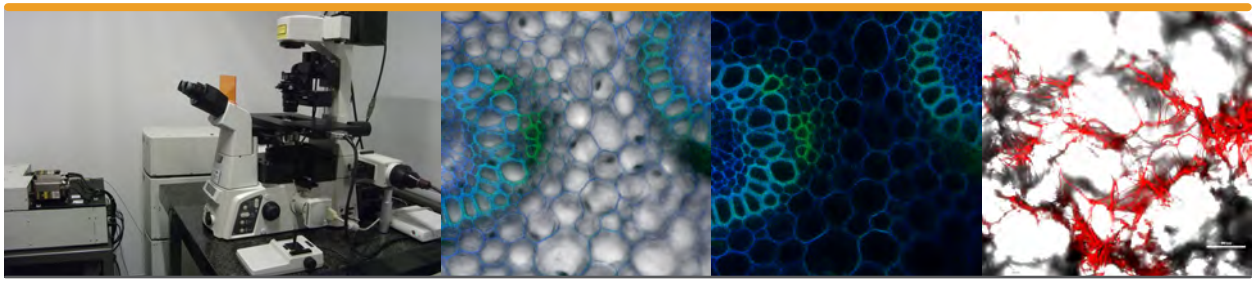
Pracownia / Zespół **Zespół Badań Fotochemicznych i Luminescencyjnych**

Kierownik **dr hab. Mariusz Kępczyński, prof. UJ**

Badania Realizowane usługi obejmują
– obrazowanie fluoryzujących obiektów o rozmiarach większych od 1 µm,
– tworzenie obrazów trójwymiarowych oraz wirtualnych przekrojów poprzecznych i podłużnych badanych obiektów,
– pomiary intensywności fluorescencji w wybranym obszarze obrazu i/lub w czasie,
– pomiary i analiza widm fluorescencji fluoryzujących obiektów.

Aparatura mikroskop konfokalny składa się z:
– odwróconego mikroskopu Nikon Ti-E wyposażonego w pięć obiektywów o powiększeniach 4x, 10x, 20x, 40x, 100x oil;
– skanera Nikon A1 posiadającego cztery niezależne kanały detekcyjne dla fluorescencji oraz dodatkowy detektor światła przechodzącego;
– skanera spektralnego 32-kanałowego (rozdzielczość 2,5, 6 i 10 nm);
– czterech laserów diodowych: 405, 488, 561 i 638 nm

Kontakt **dr hab. Mariusz Kępczyński, prof. UJ,** kepczyns@chemia.uj.edu.pl, tel. 12 686 2532



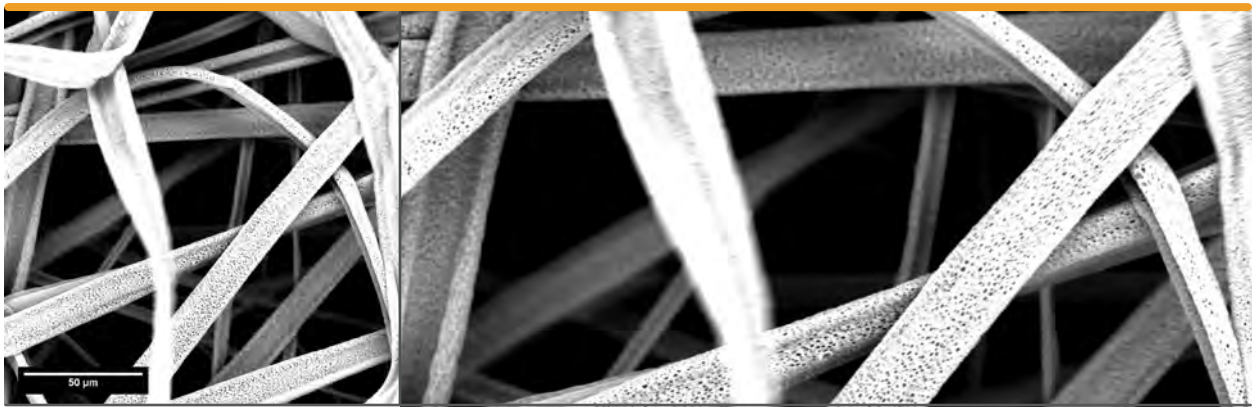
Pracownia / Zespół **Zespół Kinetyki Reakcji Heterogenicznych**

Kierownik **prof. dr hab. Joanna Paczkowska**

Badania Laboratorium Zespołu oferuje:
- badania katalizatorów in situ w strumieniu reagentów i do temperatury 1000 ˚C,
- określanie struktury powierzchni katalizatorów na bazie tlenków, azotków i węglików metali oraz produktów przejściowych reakcji w modzie in situ,
- wielkoseryjne testowanie aktywności katalitycznej badanych materiałów,
- przeprowadzanie termicznie programowanych reakcji,
- wyznaczanie rozkładów mas cząsteczkowych polimerów syntetycznych i naturalnych,
- otrzymywanie materiałów techniką elektroprzędzenia,
- modyfikację materiałów techniką niskotemperaturowej plazmy.

Aparatura konfokalny mikroskop ramanowski pord.Jobin Yvon, model LabRam HR wyposażony w 3 lasery: 633 nm, 514 nm, 325 nm, sprzężony z mikroskopem sił atomowych prod.Park Systems, model XE-100, zestaw do charakterystyki katalizatorów CATLAB prod. Hiden Analytical, FTIR THERMO Nicolet 8700, przystawki: Golden Gate Diamond ATR, Specac; Praying Mantis Harrick, chromatograf żelowy, zestaw do elektrospiningu

Kontakt **prof. dr. hab. Joanna Paczkowska,** joanna.lojewska@uj.edu.pl, tel. 12 686 2462
dr Dominika Pawcenis, d.pawcenis@uj.edu.pl, 12 686 2474
www.kinecat.pl



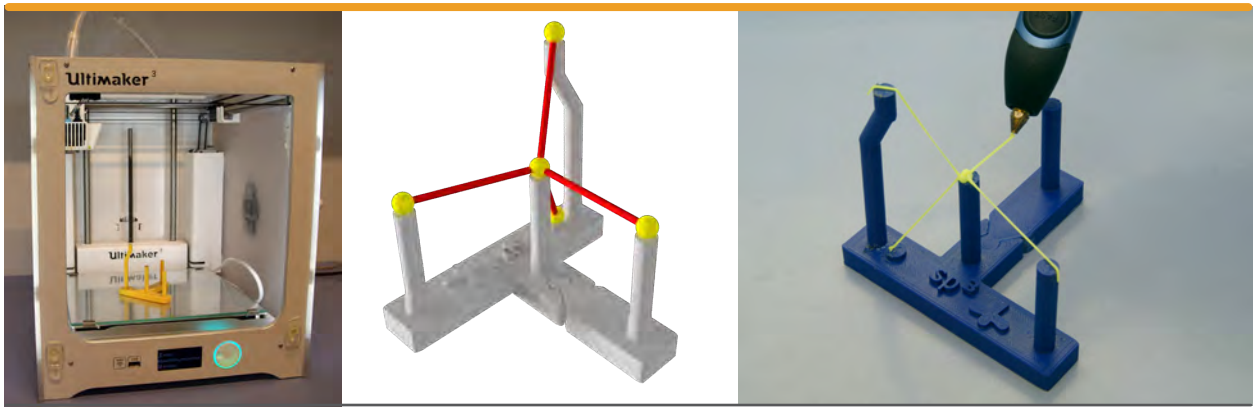
Pracownia / Zespół **Zakład Dydaktyki Chemii**

Kierownik **prof. dr hab. Wacław Makowski**

Badania
- Projektowanie i tworzenie pomocy dydaktycznych,
- Badania efektywności narzędzi i pomocy dydaktycznych, programów oraz metod nauczania i doskonalenia zawodowego nauczycieli szkolnych i akademickich,
- Opracowywanie kursów b-elearningowych, e-learningowych i kursów typu MOOC,
- Projektowanie i konsultowanie sylabusów kursów dla studentów w nauczaniu stacjonarnym oraz zdalnym,
- Planowanie i realizacja: kursów dla nauczycieli, pokazów chemicznych, zajęć laboratoryjnych dla uczniów,
- Realizacja oraz montaż nagrań wykładów, pokazów i doświadczeń chemicznych,
- Hospitacje wspierające nauczycieli akademickich.

Aparatura Szkolne systemy pomiarowe (LabQuest, CoachLab), sprzęt do nagrywania i montażu materiałów wideo w jakości 4K, drukarka 3D (druk filamentami klasycznymi i specjalistycznymi).

Kontakt **dr Paweł Bernard, prof. UJ,** pawel.bernard@uj.edu.pl, tel. 12 686 24 32
dr Iwona Maciejowska, prof. UJ, iwona.maciejowska@uj.edu.pl, tel. 12 686 24 30
https://zdch.uj.edu.pl



Pracownia / Zespół **Zespół Katalizy i Fizykochemii Ciała Stałego II**

Kierownik **prof. dr hab. Wacław Makowski**

Badania Badania właściwości adsorpcyjnych materiałów porowatych (m.in. zeolitów, uporządkowanych mezoporowatych krzemionek, sieci metalo-organicznych) – badania adsorpcji N2, Ar, CO2, H2O oraz par węglowodorów i innych lotnych związków organicznych
Charakteryzowanie porowatości ciał stałych

Aparatura aparatura do pomiarów izoterm adsorpcji gazów i par Autosorb iQ (Quantachrome/Anton Paar); aparatura do pomiarów kwazi-równowagowej termodesorpcji par

Kontakt **prof. dr hab. Wacław Makowski,** waclaw.makowski@uj.edu.pl, tel. 12 686 24 71

Pracownia / Zespół **Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej**

Kierownik **dr hab. Marlena Gryl**

Badania Zakres wykonywanych usług obejmuje:
- pomiary XRD dla monokryształów związków małocząsteczkowych, związków organiczno-nieorganicznych i minerałów w szerokim zakresie temperatur,
- analiza strukturalna dla monokryształów oraz badania eksperymentalnego rozkładu gęstości elektronowej,
- pomiary współczynników załamania światła dla cieczy oraz dla kryształów (mikroskopowa metoda immersyjna),
- pomiary dwójłomności liniowej (kompensatory Ehringhausa i Bereka),
- analiza przejść fazowych za pomocą mikroskopii wysokotemperaturowej,
- obliczenia właściwości optycznych i elektrycznych dla struktur krystalicznych.

Aparatura dyfraktometry monokrystaliczne: Rigaku SuperNova i Rigaku Synergy S;
mikroskopy polaryzacyjne: Jenapol m.in. z kompensatorami do pomiarów dwójłomności liniowej oraz Zeiss Axio Scope.A1 z przystawką hot-stage Linkam do badania przejść fazowych;
spektrofotometr UV-Vis Perkin Elmer lambda 365 ze sferą całkującą; refraktometry ATAGO do badania współczynników załamania światła dla cieczy i ciała stałego

Kontakt **dr hab. Marlena Gryl,** marlena.gryl@uj.edu.pl, tel. 12 686 2472
dr Agnieszka Skórska-Stania, agnieszka.skorska-stania@uj.edu.pl, tel. 12 686 2467
www.zikas.chemia.uj.edu.pl



opracowanie tekstów redakcja Kinga Góra-Marek, Karolina Tarach

zdjęcia Adam Koprowski, zasoby własne Wydziału Chemii UJ

opracowanie graficzne skład Bożena Groborz

druk Delta Jarek Jagła

© Copyright Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

Kraków, 2021


H
Mg
12 (24,30)
Sc
Ca
Y
Ti
Sr
38 (87,62)
Zr
Ta
Cr
Tc
V
Fe
Co
Ni
Cu
W
(183,84)
Ru
Ir
Re
Os
Pt
Mt