COMBINAT
THE SCIENCE FACTORY
Conference of Modeling in BIo and NAno Technology

COMBINAT
THE SCIENCE FACTORY

Wrocław 2017

COMBINAT
THE SCIENCE FACTORY
Conference of Modeling in BIo and NAno Technology

COMBINAT
THE SCIENCE FACTORY

MATERIAŁY POKONFERENCYJNE

STRESZCZENIA WYSTĄPIEŃ

Wrocław 2017

Praca zbiorowa pod redakcją Justyny Rogackiej

Wrocław 2017

Redakcja i korekta:

Justyna Rogacka

Marcin Achremowicz

Anna Borowska

Filip Formalik

Złożono na podstawie dostarczonych materiałów.

Wszelkie prawa zastrzeżone. Żadna część niniejszej książki, zarówno w całości jak i we fragmentach nie może być reprodukowana w sposób elektroniczny, fotograficzny i inny bez zgody wydawcy i właścicieli praw autorskich.

Copyright by COMBINAT The Science Factory, Wrocław 2017

ISBN

www.combinat.pwr.edu.pl
www.bang.pwr.edu.pl

Wydawca:

Wydanie 1

GŁÓWNY ORGANIZATOR

BANG

BIOCHEMISTRY AND
NANOPHYSICS GROUP

SPONSORZY

PATRONAT

Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego

MINISTERSTWO ROZWOJU

Politechnika Wrocławska

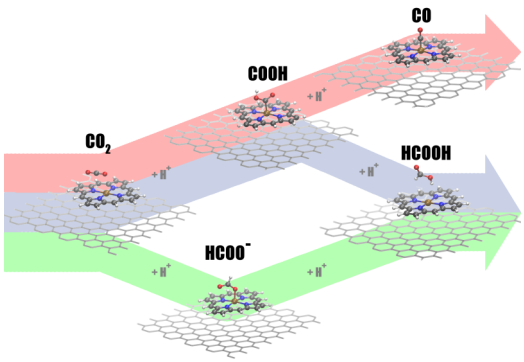
Imię i nazwisko: Bartłomiej Szyja

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Iron metalloporphyrins as catalysts in homogenous and electrochemical reduction CO_2 by protonation to formic acid

The reduction of CO_2 , to energy carrier molecules is possible only via application of specific catalysts that are able to activate the inert molecule of carbon dioxide. In the presented study we performed quantum-chemical calculations to thoroughly investigate the mechanism of homogenous reduction of CO_2 with the usage of heterocyclic catalysts – Porphyrins [$Me^0C_{20}N_4H_{12}$] in water environment simulation and with the use of graphene sheets for the electrochemical approach. Metals chosen for the centre of the macrocycle was iron atom [Fe].

Figure 1: Proposed electrochemical pathway of



the carbon dioxide proton by proton reduction.

An electrochemical and homogenous applications have been thoroughly tested. We have established the process of activation and coordination of the carbon dioxide with the catalyst molecule, which determines the later stages of the proposed reaction cycle. A few potential pathways were taken into consideration as was suggested by the models proposed in the literature [1].

For the optimisation of the stationary states of the proposed reaction DFT mechanism application using ORCA code with PBE SVP for preliminary optimisation and PBE0 functional with triple zeta Def2-TZVP implemented for higher accuracy. The initial results were used to perform simulations using VASP code to perform simulations for the investigated electrochemical path. DFT functional used was PBE, as the exact HF exchange in the plane-wave approach is too computationally demanding. The completeness of the basis set was set by the energy cut-off 400 eV. The optimizations were carried out until the forces dropped below 0.01 eV/Ang. From the performed simulations we have derived that the coordination of the CO_2 can take place through the hydrogen molecule, an single hydrogen atom coordinated by the metallic centre or directly to the metallic centre of the porphyrin catalyst. As it was established, the chosen activation mode determines the optimal reaction pathway and the selectivity of the cycle that leads to the formic acid.

Acknowledgements: Calculations were carried out thanks to computational resources of Wrocław Centre of Networking and Supercomputing (WCSS), Academic Computer Centre in Gdansk and Interdisciplinary Centre for Mathematical and Computational Modelling (ICM).

Bibliografia:

1. Morris,A.J.; et al. *Acc. Chem. Res.* **2009**, pp. 11973

Imię i nazwisko: Anna Chudoba

Jednostka naukowa: Uniwersytet Opolski, Wydział Chemii

Opiekun naukowy: prof. dr hab. inż. Szczepan Roszak, dr inż. Zygmunt Flisak

Od monomeru heterocyklicznego do polimeru przewodzącego

Odkrycie przewodnictwa metalicznego w domieszkowanym poliacetylenie [1] doprowadziło do powstania nowego obiecującego obszaru badawczego – organicznych przewodników. Jednak pewne właściwości, takie jak nietrwałość względem powietrza i trudności w przetwarzaniu uniemożliwiły jego praktyczne zastosowanie. W odpowiedzi na te trudności nauka zwróciła się ku sprzężonym pierścieniom (hetero)cyklicznym opartym na podstawionych pirolu, tiofenie i furanie, prowadzących do polimerów oraz kopolimerów [2].

Przewodzenie prądu w materiałach wyjaśnia pasmowa teoria przewodnictwa. Według niej przewodzenie zależy od tego jaka jest szerokość przerwy zabronionej pomiędzy pasmem przewodnictwa a walencyjnym, co dla polimerów odpowiada różnicy pomiędzy orbitalami LUMO (ang. Lowest Unoccupied Molecular Orbital*)* i HOMO (ang. Highest Occupied Molecular *Orbital*). Znajomość właściwości cząsteczkowych umożliwia oszacowanie właściwości materiałów w skali makroskopowej.

W pracy badano metodami chemii kwantowej zmianę szerokości przerwy zabronionej wraz ze wzrostem stopnia polimeryzacji (DP). Zauważono, że już przy niskim stopniu polimeryzacji właściwości oligomerów zbiegają się do właściwości polimerów. Syntezowane polimery przewodzące charakteryzują się względnie niskim stopniem polimeryzacji. Oligomery o DP=40-50 osiągają zwykle właściwości elektronowe nierozróżnialne od tych charakteryzujących polimery [3]. Pokazuje to, że teoretyczne badania właściwości oligomerów w celu szacowania właściwości polimerów przewodzących jest właściwe.

Bibliografia:

1. Shirakawa H., Louis E.J., MacDiarmid A.G., Chiang C.K., Heeger A.J., (1977). Synthesis of electrically conducting organic polymers: halogen derivatives of polyacetylene, $(CH)_x$. *Journal of the Chemical Society, Chemical Communications*, nr 16, 578-580.
2. Heeger A.J., (2010). Semiconducting polymers: the Third Generation. *Chemical Society Reviews*, nr 39, 2354-2371.
3. Roncaldi J., (2007). Molecular Engineering of the Band Gap of π-Conjugated Systems: Facing Technological Applications. ***Macromolecular Rapid Communications***, nr 17, 1761-1775.

Imię i nazwisko: Magdalena Legendziewicz

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr inż. Sonia Zielińska

Polimerowe mikro- i nanostruktury fotoczułe

Polimerowe nano- i mikrostruktury fotoczułe są to cząstki wypreparowane z polimeru zawierającego w łańcuchu lub w matrycy polimerowej pochodną azobenzenu lub inny chromofor. Wspomniane struktury za sprawą ruchów grup chromoforoowych przyłączonych do łańcucha polimerowego ulegają odkształceniu pod wpływem światła. Odkształcalność takich struktur jest zależna m. in. od rodzaju struktury, rozmiarów, rodzaju polimeru, z którego zostały wypreparowane, a także od jego temperatury zeszklenia. Zarówno sfery jak i rurki w skali nano cieszą się coraz większym zainteresowaniem. Fotoczułe nanosfery, nanostruktury o kształtach cylindrycznych oraz ultracienkie filmy polimerowe mogą zostać wykorzystane w produkcji przełączników molekularnych(1). Przełączniki oparte na azobenzenie mogą być znaleźć zastosowanie jako molekularne układy zdolne do przechowywania energii cieplnej ze Słońca. Znaczenie przełączników molekularnych w technologii staje się coraz większe. Obecnie kładzie się duży nacisk na ich fotochromową odmianę, gdyż wykorzystywana jest ona w produkcji światłowodów i materiałów światłoczułych służących do optycznego zapisu i przekazywania informacji (2).Nanorurki fotoczułe, z kolei, dzięki swej periodycznej strukturze oraz unikanlnym właściowościom mogą znaleźć zastosowanie w fotonice i optoelektronice. Nie tylko kształt tych struktur wywołał tak duże zaintersowanie, ale także zdolność tego typu materiałów do generacji drugiej harmonicznej, czy możliwość wykorzystania ich jako szablony. Z azopolimerowych nano- i mikrostruktur można tworzyć różne elementy fotoniczne, na przykład: sensory plazmoniczne, mikrosoczewki gradientowe, nanostrukturalne przetworniki polaryzacji światła.

W niniejszej pracy ukazany został sposób otrzymywania polimerów fotochromowych; homo- oraz kopolimerów metakrylowych i poliuretanów oraz w dalszym etapie preparatykę mikro- i nanostruktur fotoczułych. Zbadano właściwości powyższych struktur; preparaty naświetlano laserem o długości fali świetlnej wynoszącej 445 nm, a zmiany obserwowano pod mikroskopem optycznym. Proces fotoizomeryzacji i relaksacji termicznej obserwowano za pomocą spektrofotometru UV-VIS. Na podstawie wyników przeprowadzonych badań, wytypowano materiał najlepiej nadający się do otrzymania nanostruktur fotoczułych za pomocą wybranych metod oraz określono najbardziej optymalne warunki preparatyki mikrosfer. W dalszych badaniach przeprowadzona zostanie optymalizacja otrzymywania nanorurek

Bibliografia:

1. Ben L. Feringa,Wesley R. Browne, (2011**)** *Molecular Switches*, 151-156str,
2. K. Bartyzel, (2015), *Przełączniki molekularne rodzaje i zastosowania*, *Wiadomości Chemiczne,*69, 7-8

Imię i nazwisko: Mariusz Nowak

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr inż. Łukasz Radosiński

Wpływ enzymów na proces warzenia piwa

Etap zacierania jest uznawany w produkcji piwa za najważniejszy w całym procesie. W trakcie tego procesu śruta przechodzą do roztworu jako składniki ekstraktu. Główna ilość ekstraktu powstaje na skutek działania enzymów. Enzymy – jako biokatalizatory – mają zaś określone, optymalne przedziały temperatur i przyśpieszają lub opóźniają reakcje chemiczne.

Celem enzymów jest hydroliza związków organicznych zawartych w zmielonym słodzie: skrobi, β-glukanu, substancji białkowych, substancji tłuszczowych i fosforanów. Piwowar wykorzystuje zacieranie do redukcji wyższych cukrów do prostszych, fermentujących postaci. W tym celu potrzebna jest aktywność enzymów amylolitycznych, które umożliwiają rozkład cukrów do form prostych lub dekstryn.

Dzięki temu, że enzymy zawarte w skrobi działają optymalnie w różnych przedziałach, piwowar jest w stanie w sposób skuteczny kontrolować proces rozkładu skrobi oraz białek (protein). Staranne wykonanie procesu zacierania jest podstawą do dalszej obróbki brzeczki oraz cech charakterystycznych gotowego piwa, to jest jego barwy i aromatu. Różnorodność piw na rynku świadczy o zastosowaniu słodów i chmieli różnego rodzaju i w różnych proporcjach. Wymusza to zatem na piwowarach konieczność stałego doskonalenia i dostosowywania techniki zacierania.

Bibliografia:

1. Lehrl R. (2008), *Domowe warzenie piwa*, wyd.RM, ss. 52-65;
2. Daniels R. (2000), *Designing great beers*, wyd. Brewers publication, ss. 19-26;
3. Polski portal piwowarski, http://www.wiki.piwo.org/Zacieranie_ziarna (dostęp 02.02.2017 r.);
4. Podeszwa T., Rutkowska W. (2015), *Wpływ warunków słodowania ziarna gryki na zawartość ekstraktu, barwę oraz lepkość brzeczek laboratoryjnych (kongresowych)*, Prace Naukowe Uniwersytetu Ekonomicznego we Wrocławiu = Research Papers of Wrocław University of Economics, 2015, Nr 411, ss. 115-123;
5. Dąbek A. *Proces produkcji piwa*, repozytoria udostępnione przez Uniwersytet Rzeszowski (dostęp 02.02.2017 r.).

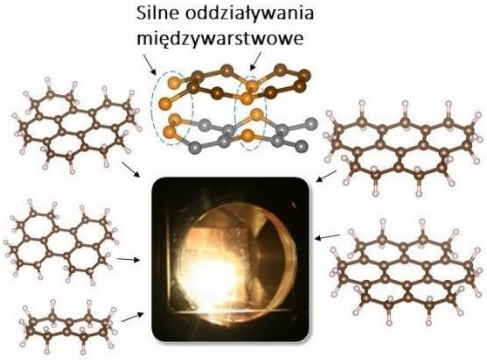
Imię i nazwisko: Adam Olejniczak

Jednostka naukowa: Zakład Spektroskopii Stanów Wzbudzonych, Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego Polskiej Akademii Nauk

Opiekun naukowy: dr Bartłomiej Cichy, prof. Wiesław Stręk

Emisja światła z materiałów grafenowych – rozważania teoretyczne

Od czasu odkrycia grafenu (Novoselov et al., 2012) materiał ten wzbudza nieustanne zainteresowanie naukowców, technologów i przedsiębiorców na całym świecie. Unikalne właściwości grafenu takie jak duża ruchliwość nośników oraz wytrzymałość mechaniczna wskazują na jego potencjalne zastosowanie w optoelektronice np. do produkcji bardzo cienkich i elastycznych wyświetlaczy, nowej generacji tranzystorów, detektorów czy laserów (Novoselov et al., 2012). Jednakże ze względu na zerową przerwę energetyczną luminescencja z czystego grafenu nie może być obserwowana (Novoselov et al., 2012).



***Rysunek 1**. Schematyczne przedstawienie oddziaływania międzywarstwowego (na górze), różne klastery grafenowe emitujące w zakresie NIR/VIS/NUV (po bokach) oraz ceramika grafenowa (w środku).*

Niedawne doniesienia eksperymentalne wskazują na możliwość generacji szerokopasmowej emisji światła białego z materiałów pochodnych grafenu jak ceramika grafenowa (Strek et al., 2015, rysunek 1) oraz pianka grafenowa (Strek et al., 2017) po pobudzeniu laserem pracy ciągłej z zakresu widzialnego i bliskiej podczerwieni. Temperatura próbki pozostaje poniżej 900 K dla największej mocy pobudzania (1.5 W), a intensywność emisji nie zmienia się po ochłodzeniu próbki do 10 K. Wyklucza to możliwość wytłumaczenia obserwowanej emisji teorią promieniowania ciała doskonale czarnego. Przedstawiamy model emisji światła z materiałów grafenowych zawierających lokalnie oddziałujące warstwy grafenowe. W naszym modelu zakładamy, że

intensywne pobudzanie laserowe może spowodować lokalną zmianę hybrydyzacji atomów węgla w grafenie sp^2 sp^3 oraz powstanie domen grafenowych ograniczonych atomami węgla w hybrydyzacji sp^3. W rezultacie elektrony z wnętrza domen są uwięzione, przez co ich dozwolone poziomy energetyczne są skwantowane. Różnice energii pomiędzy tymi poziomami są rzędu pojedynczych elektronowoltów, a przechodzenie elektronów pomiędzy poziomami umożliwia absorpcję/emisję w zakresie widzialnym, bliskiej podczerwieni i bliskiego ultrafioletu.

Bibliografia:

1. Novoselov, K. S., Fal'ko, V. I., Colombo, L., Gellert, P. R., Schwab, M. G., & Kim, K. (2012). A roadmap for graphene. *Nature*, *490*(7419), 192–200.
2. Strek, W., Cichy, B., Radosinski, L., Gluchowski, P., Marciniak, L., Lukaszewicz, M., & Hreniak, D. (2015). Laser-induced white-light emission from graphene ceramics–opening a band gap in graphene. *Light: Science & Applications*, *4*(1), e237.
3. Strek, W., Tomala, R., Lukaszewicz, M., Cichy, B., Gerasymchuk, Y., Gluchowski, P., … Hreniak, D. (2017). Laser induced white lighting of graphene foam. *Nature Publishing Group*, (January), 1–9.

Imię i nazwisko: Marcelina Pyclik

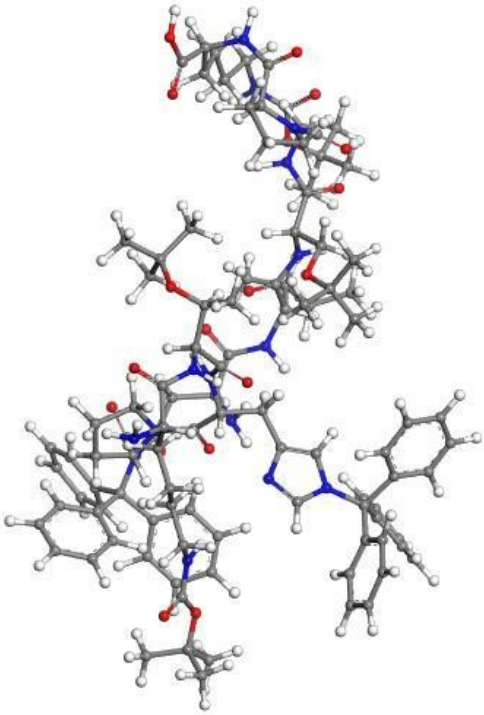
Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr Ewa Brzozowska

Wykorzystanie modelu molekularnego do monitorowania przebiegu reakcji syntezy peptydów na podłożu stałym

Jednym z etapów projektu „Charakterystyka immunogennych białek *S. agalactiae* wraz z identyfikacją epitopu rozpoznawanego przez przeciwciała ochronne krwi pępowinowej" było uzyskanie wyselekcjonowanego peptydu w formie wolnej. Procedura takiej syntezy jest prosta, a oczyszczanie takiego związku szybkie. [1] Technika ta ma kilka ograniczeń: niska wydajność długich peptydów. oraz rozmieszczenie przestrzenne łańcucha peptydowego.

Dlatego też czas przyłączania poszczególnych aminokwasów ulega wydłużeniu w miarę wzrostu łańcucha. Podobna sytuacja może mieć miejsce w momencie, gdy konstruowany łańcuch zwija się tak, że uniemożliwia przyłączenie kolejnej jednostki. W tym przypadku można zastosować większą dawkę reagentów, zwiększyć mieszanie w roztworze lub zwiększyć czas inkubacji. [2] Przed przeprowadzeniem syntezy peptydu wykonano modelowanie molekularne całego procesu, ponieważ peptyd w swojej budowie zawierał dwie proliny, które mogły znacznie wpływać na strukturę łańcucha. [3] Dodatkowo aminokwasy wykorzystywane przy syntezie zwierały grupy blokujące, które z powodu swoich rozmiarów mogły ograniczać dostępność łańcucha [4].



Rys 1. Model peptydu KPGSINPHTKF

Pierwszym krokiem było stworzenie modeli aminokwasów z grupami blokującymi oraz ich optymalizacja w Materials Studio, następnie zbudowano łańcuch, który optymalizowano po dodaniu kolejnego aminokwasu oraz wykonano dynamikę metodą pola siłowego (forcefield: Universal). Oznaczono punkty krytyczne w syntezie, przez które szybkość syntezy może spaść, a dane wykorzystano podczas pracy laboratoryjnej.

Bibliografia:

1. Behrendt, R., White, P. & Offer, J. Advances in Fmoc solid-phase peptide synthesis. *J. Pept. Sci.* **22,** 4–27 (2016).
2. Borgia, J. A. & Fields, G. B. Chemical synthesis of proteins. *Trends Biotechnol.* **18,** 243–251 (2000).
3. MacArthur, M. W. & Thornton, J. M. Influence of proline residues on protein conformation. *J. Mol. Biol.* **218,** 3 (1991).
4. Isidro-Llobet, A., Lvarez, M. & Albericio, F. Amino acid-protecting groups. *Chem. Rev.* **109,** 2455– 2504 (2009).

Imię i nazwisko: Kinga Szkaradek

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr Bartłomiej Szyja

Badanie mechanizmu adsorpcji heparyny i jej pochodnych wewnątrz metaloorganicznej struktury MIL-101

Doskonalenie metod zamykania leków wewnątrz biokompatybilnych struktur jest konieczne, ponieważ każdy lek potrzebuje indywidualnego podejścia do jego uwalniania w organizmie. W danym projekcie, do zamykania antykoagulantów wykorzystano adsorbent hybrydowy, jakim jest Cr/Fe -MIL-101, gdzie atomy metali są połączone mostkami organicznych ligandów , które są zestawione w trójwymiarową strukturę głównie przez silne wiązania koordynacyjne.

Przebadano mechanizm reakcji adsorpcji heparyny i jej pochodnej (fondaparynux) do atomów żelazowych w węzłach. Przeprowadzono także analizę porównawczą tego procesu w przypadku toksycznej modyfikacji MOFu z chromowym centrum aktywnym.

Mechanizm reakcji po zoptymalizowaniu wszystkich struktur (PBE/6-31G(d,p) z modelem ciągłym rozpuszczalnika) przebadano metodą dynamika molekularna/DFT.

Dotychczasowe wyniki opierają się na obserwacji 3 typów adsorpcji monomerów heparyny do węzła metaloorganicznego. Przeprowadzone symulacje wykazały stadium, w którym występuje destrukcja modelu w układzie, co daje nadzieję na powodzenie metody powolnego uwalniania leku i rozłożenia się adsorbentu bez szkody dla organizmu.

Wszystkie obliczenia odnoszone są do drugiej, eksperymentalnej części projektu, którą prowadzi Uniwersytet ITMO w Sankt Petersburgu.

Rys. 1. Model przyłączenia jednego z pięciu monomerów heparyny do węzła żelazowego (Fe)MIL-101.

Bibliografia:

1. Bhattacharjee, S., Chen, C., & Ahn, W. S. (2014). Chromium terephthalate metal–organic framework MIL-101: synthesis, functionalization, and applications for adsorption and catalysis. *RSC Advances*, *4*(94), 52500-52525.

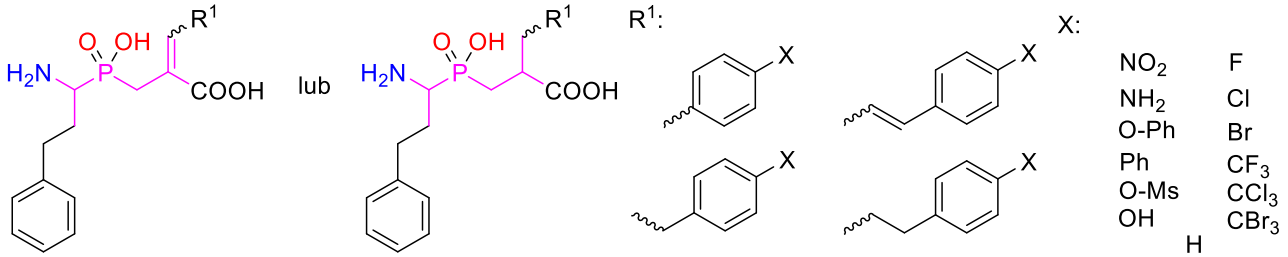
Imię i nazwisko: Michał Talma

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Zakład Chemii Bioorganicznej

Opiekun naukowy: prof. dr hab. inż. Artur Mucha

Modelowanie oddziaływań fosfinodehydrodipeptydów i fosfinodipeptydów w centrum aktywnym ludzkiej aminopeptydazy N

Fosfinodipeptydy i fosfinodehydrodipeptydy znane są jako dobre inhibitory metaloproteaz [1]. Ludzka aminopeptydaza N to dimeryczne białko błonowe należące do rodziny metaloproteaz cynkowych. Zaangażowana jest w liczne procesy biochemiczne i jest ważnym celem w terapii nowotworowej. Znany jest model wiązania ligandów w jej centrum aktywnym [2]. Za pomocą wyników modelowania molekularnego nowych analogów peptydów o niekanonicznych grupach bocznych i określonej konfiguracji możliwe jest zaprojektowanie nowych inhibitorów.



Rysunek 1. Fosfinodehydrodipeptyd, fosfinodipeptyd, grupy boczne R^1 oraz podstawniki X.

Fosfinodehydrodipeptydy i fosfinodipeptydy podzielono na cztery główne grupy w zależności od rodzaju grupy aromatycznej R^1. Następnie rozpatrzono różne podstawniki X w pozycji *para*. Dla każdego ze związków uwzględniono konfigurację absolutną atomów węgla α i izomerię geometryczną. Związki zoptymalizowano z wykorzystaniem pola oddziaływań CHARMm. Odtworzono centrum aktywne ludzkiej aminopeptydazy N wykorzystując dane krystalograficzne dostępne w bazie PDB [2]. Dokowanie prowadzono w programie *Discovery Studio* z wykorzystaniem algorytmu LibDock [3] dla każdego z diastereoizomerów. Kryterium oceny było prawidłowe oddziaływanie związków z atomem cynku. Otrzymane wyniki zostały przeliczone na oceny punktowe innych algorytmów dokujących. Obliczono również energie struktur enzym-ligand. Wyniki modelowania porównano, biorąc pod uwagę konfigurację absolutną, izomerię geometryczną oraz strukturę grupy bocznej.

W prezentacji zostaną przedstawione wyniki modelowania molekularnego fosfinodehydrodipeptydów oraz fosfinodipeptydów w centrum aktywnym ludzkiej aminopeptydazy N.

Bibliografia:

1. Georgiadis, D.; Dive, V., (2014). Phosphinic Peptides as Potent Inhibitors of Zinc-Metalloproteases. *Topics in Current Chemistry*, nr 360, 1-38.

2. Wong, A.H.; Zhou, D.; Rini, J. M., (2012). The X-ray crystal structure of human aminopeptidase N reveals a novel dimer and the basis for peptide processing. *The Journal of Biological Chemistry*, nr 287, 36804-36813.

3. Rao S. N.; Head M. S.; Kulkarni A.; LaLonde J.M., (2007). Computational Study on New Natural Compound Inhibitors of Pyruvate Dehydrogenase Kinases. *International Journal of Molecular Sciences*, nr 46, 2159-2171

Imię i nazwisko: Joanna Maria Więckowska

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr hab. inż. Robert Góra

Teoretyczne badania abiotycznych prekursorów materii ożywionej

Podstawą życia na Ziemi jest węgiel. To on tworzy struktury, które mogą oddziaływać ze sobą i budować żywe organizmy – od form najprostszych i jednokomórkowych aż do skomplikowanych wielokomórców. Od dawna wiadomo, że materia organiczna jest powszechna we Wszechświecie. Wynika stąd, że „cegiełki" potrzebne do powstania życia ziemskiego na innej planecie istnieją wśród materii międzygwiazdowej. Jednak nie wszystkie związki organiczne mogą dać początek skomplikowanym układom, które wchodzą w skład żywych istot. Współcześnie bardzo wielu naukowców bada ścieżki reakcji, które mogły dać początek materii budującej żywe organizmy. Badania nad prekursorami są prowadzone na dwa sposoby: pracą w laboratorium, gdzie sztucznie stwarza się warunki podobne do warunków kosmicznych czy panujących na wczesnej Ziemi lub modelowaniem układów i badaniem ich właściwości w określonych warunkach. Istnieje kilka postulowanych prekursorów materii ożywionej, m.in. cyjanowodór. Referat ma na celu przybliżenie najpopularniejszych hipotez związanych z ewolucją chemiczną układów, które mogły dać początek życiu ziemskiemu oraz pokazanie, że w podobny sposób życie mogło powstać w innej części Wszechświata.

Bibliografia:

1. Sutherland John, (2016). The origin of life – out of the blue. *Angewandte Chemie International Edition*, nr 55, 104-121.
2. Judit E. Sponer, Rafał Szabla, Robert W. Gora, A. Marco Saitta, Fabio Pietrucci, Franz Saija, Ernesto Di Mauro, Raffaele Saladino, Martin Ferus, Svatopluk Civisand, Jiri Sponer, (2016). Prebiotic synthesis of nucleic acids and their building block at the atomic level – merging models and mechanism frin advanced computations and experiments. *Physical Chemistry Chemical Physics*, nr 18, 20047-20066.
3. Więckowska J., (2016). Materia organiczna w przestrzeni kosmicznej, *Astronomia*, nr 47, 66-70.

Imię i nazwisko: Jarosław Zaklika

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska , Zakład Chemii Fizycznej i Kwantowej

Badania fotochemii psoralenów interkalujących DNA

Psoraleny są trójpierścieniowymi związkami, należącymi do furanokumaryn, używanymi jako czynniki terapeutyczne już od czasów starożytnych. Obecnie są rutynowo stosowane w fotochemioterapii wraz z intensywnym naświetlaniem promieniowaniem UV-A. Mechanizm molekularny reakcji oparty jest o silną tendencję psoralenów do interkalacji DNA [1-2]. Naświetlanie kompleksu promieniowaniem UV-A o długości fali ~360 nm skutkuje 2+2 cyklo-addycją w obu jego fotoreaktywnych miejscach poprzez wiązanie się z atomami 5,6 węgla w cząsteczkach pirymidyn. Absorpcja drugiego fotonu skutkuje połączeniem trwałymi wiązaniami chemicznymi dwu-niciowej helisy DNA. Jednak wydajność tego procesu jest raczej niska (<9%) [2].

Fröbel z współpracownikami zaobserwowali znaczącą redukcję czasu życia stanu S1 4'-aminometylo-4,5,8-trimetylopsoralenu (AMT) używając femtosekundowej spektroskopii absorpcyjnej [2]. To singletowe wygaszenie wydaje się być spowodowane ultraszybkim przeniesieniem elektronu z puryny na AMT i zmianę ładunku wywołaną przez niską wydajność kwantową tworzenia adduktu. Jednakże szczegóły mechanizmów tych procesów nie zostały wyjaśnione.

Moje badania skupiają się nad wyjaśnieniem procesu reakcji fotochemicznej 4-hydroksymetylo-4,5,8-trimetylopsoralenu (HMT) interkalującego model podwójnej nici DNA. Do znalezienia reprezentatywnych konformerów modelowego kompleksu DNA z psoralenem użyłem technik mechaniki i dynamiki molekularnej Następnie dla wyselekcjonowanych struktur skonstruowałem model układu do obliczeń ab initio. Przeprowadziłem obliczenia werdykalnych widm wzbudzenia, następnie zlokalizowałem istotne minima na powierzchni stanu wzbudzonego i minimalną energię punktów przecięcia oraz wykonałem obliczenia energii potencjalnej przecięć powierzchni używając metod TD-DFT, ADC(2) i CASPT2/CASSCF. Moje wstępne rezultaty potwierdzają eksperymentalne przypuszczenia o ultraszybkim przeniesieniu ładunku z DNA na psoralen.

Podziękowania:

Większość obliczeń została wykonana przy użyciu zasobów udostępnionych przez Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe (http://wcss.pl), grant obliczeniowy nr 249.

Bibliografia:

1. Kitamura, N,; Kohtani, S,; Nakagaki, R,; J. Photochem. Photobio. C: Photochem. Rev. 2005, 6 (2–3), 168–185.
2. Fröbel, S.; Reiffers, A.; Torres Zeigenbein, C.; Glich, P.; J. Phys. Chem. Lett., 2015, 6 (7), 1260-1264.

Imię i nazwisko: Marcin Achremowicz

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr inż. Łukasz Radosiński

Forcefield adaptation for modelling of fluorite crystalline structure

Fluorite mineral is the major source of fluorine for production of fluoroorganic reagents, teflon and other polymers, water treatment, petrochemical catalysts, glasses, ceramics. Basic method of fluorite processing is froth flotation. Deeper insight into the water – surface interactions may be crucial in any trial of process enhancement. Quantum methods previously used [1] are not sufficient for huge molecular systems concerning hundreds of thousands of atoms. In this work found INTERFACE v. 1.5 Force Field parameters for calcium and fluorine ions in crystal bulk which is the first step to fluorite modelling by Molecular Dynamics approach. Obtained crystal cell size shows convergence to ab initio calculations [3] and experimental crystallographic data. Distances between relaxed crystal layers in three crystallographic surfaces (111, 110, 100) are comparable to Janicki et al. quantum work [3]. Presented results provide opportunity of modelling fluorite crystal using versatile INTERFACE forcefield which has already been widely validated for interactions between crystal surfaces and organic compounds in water environment.

References:

1.Maldonado P. et al., (2013). Ab Initio Prediction of Surface Stability of Fluorite Materials and Experimental Verification, J. Phys. Chem. 117, pp. 6639−6650.

2.Emmami F. et al., (2014). Force Field and a Surface Model Database for Silica to Simulate Interfacial Properties in Atomic Resolution, J. Chem. Mater., 2014, 26 (8), pp 2647–2658.

3.Janicki M. et al.,(2015). Structure and surface energy of both fluorite halves after cleaving along selected crystallographic planes, Physicochem. Probl. Miner. Process. 52(1), pp. 451−458.

Somasundaran P. et al., (1987). Reagents in Mineral Technology.

Imię i nazwisko: Ewa Białek

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr inż. Łukasz Radosiński

Lidocaine- literature review of properties and application

Lidocaine is widely used in the treatment of pain and selected as a model drug because its use is limited by short duration of its effects. Maximum stability of lidocaine attributables to conditions at room temperature (20 ° C) and a pH in the range 3-6. In the presence of metal Fe and Cu ions lidocaine has the most reactive properties. [1]

During release lideocaine shows the Higuchi square root law time kinetic with r>0.98. In gels with additives of NaCl or PEG 400 aqueous solutions which are hydrophilic, lidocaine shows the reduced time of drug diffusion and that give a possibility to create and use a poloxamer gel with sustained release rejectable formulation. [2]

Presence of lidocaine in both form (charged and uncharged) cause changes in membrane properties. It has been found that the membrane-water partition coefficient of the uncharged form is higher than that of the charged form by 1.15 and that causes balance between the charged and uncharged forms is shifted in favour of the uncharged species. Positively charged lidocaine increases the electrostatic potential inside a membrane. Important fact is behaviour of the headgroup dipoles is the main factor behind the membrane electrostatics. Membrane dipole potential is caused by the effect from repulsion between the positive charge on lidocaine molecules, located at the level of phosphate and ester groups, and the positive charge on the choline group. The electrostatic potential in the lipid tail region is almost the same for both charged and uncharged lidocaine at equal concentrations, but mechanism of the change of the electrostatic potential is different for the two forms. The charged lidocaine, together with neutralizing Cl− ions, has a strong influence on the behaviour of the lipid headgroups. The uncharged lidocaine keeps the lipid structure and associated charge distribution almost intact. The total electrostatic potential in the middle of the membrane increases in this case because of partial charges on the lidocaine itself, with the main contribution from dipole moment of the carbonyl group.[3]

Bibliografia:

1. Stability of lidocaine in aqueous solution: effect of temperature, pH, buffer, and metal ions on amide hydrolysis. Institute of Pharmaceutical Sciences, Syntex Research, Palo Alto, California 94304
2. Sustained release of lidocaine from Poloxamer 407 gels. Laboratory of Pharmaceutical Technology, Department of Pharmaceutical Sciences, Ribeirão Preto School of Pharmaceutical Sciences, University of São Paulo, Av. do Café, s/n, 14040-903 Ribeirão Preto, SP, Brazil.

Imię i nazwisko: Karolina Bogacka

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: Dr Inż. Łukasz Radosiński

Predicting mechanical properties of polyimide/silica nanocomposite based on molecular dynamics simulation method

The research is focused on building the initial unit cell models of polyimide/silica nanocomposite. The phenomenon was investigated before by Xu J. et al. and this work is based on their studies in order to confirm the possibility of mechanical properties' modulation of nanocomposite. Incorporation of silica fraction to the polymer has an influence on composites' mechanical properties due to the improvement of thermal stability and electric property. This fact is a big advantage in the area of projecting and synthesizing new materials since researchers' requirement on materials still becomes higher. In this case nanocomposite consists of polyimide and silica nanoparticles which constitute 5 vol.% of the system. The crucial parameters which are desired to be investigated in the whole research are Young modulus, shear modulus, bulk modulus and Poisson ratio. The research involves building the nanoparticle's crystal and polymer chain model, geometry optimization, creating nanocomposite unit cell model, calculation of molecular dynamics and simulation of mechanical properties. Simulation and computations are conducted in Materials Studio whilst achieving the proper value of material's density is obtained by molecular dynamics simulation method. So far, the stages successfully conducted involve building the components: polyimide chain and silica nanoparticle as well as the system's model of nanocomposite. The crucial aim of the research is proving that reinforcement of material's mechanical properties can be achieved by filling the system with the small amount of silica-nanoparticles.

Bibliografia:

1. Mo Y., Hui Z., Xu J., (2014). Molecular dynamic simulation of the mechanical properties od PI/SiO_2 nanocomposite based on materials studio. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*, nr 6, 1534-1539.
2. Liu Q., Gao L., Gao Z., Yang L., (2007). Preparation and characterization of polyimide/silica nano-composite spheres. *Materials Letters,* nr 61, 4456-4458

Imię i nazwisko: Anna Borowska

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr Łukasz Radosiński

The role of molecular dynamics simulations in drug design

Nowadays, the development of computers enable researchers to investestigate large macromolecular systems. Atomistic simulations of macromolecules play a crucial role in drug design. Among all tools available to design new drugs, molecular dynamics (MD) simulations together with DFT methods have become crucial techniques [1]. The foundations of molecular dynamics simulations and limitations of the method are presented in this work. Structures of proteins obtained from the experiments provide only the rigid entites. In fact proteins are flexible in a limited range and their dynamics plays an important role in their functional parameters. Molecular dynamics may be a proper tool to predict protein conformational structure and their dynamic properties. The review describes roles of the MD simulations in drug design - the identification of cryptic or allosteric binding sites, the study of binding mode of a small molecule in a macromolecules and the protein structure prediction [2]. The future of computer-aided design seems to be very promising due to pernament enhancements in both computer power and modelling tools. Molecular dynamics simulations seem to play an increasingly significant role [3].

Bibliografia:

1. Mortier J., Rakers Ch., (2015). The impact of molecular dynamics on drug design: applications for the characterization of ligand-macromolecule complexes. *Drug Discovery Today*, nr 20, 686-702.
2. Hospital A., Goni R.J., (2015). Molecular dynamics simulations: advances and applications. *Advances and Applications in Bioinformatics and Chemistry,* nr 8, 37-47.
3. Durrant J., McCammon J., (2011). Molecular dynamics simulations and drug discovery. *Journal of Biology*, nr 5, 9-71.

Imię i nazwisko: Monika Czerniejewska[1], Anna Lesiak[2], Mateusz Bański[1], Artur Podhorodecki[1]

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, [1]*Katedra Fizyki Doświadczalnej,* [2]*Zakład Chemii Medycznej i Mikrobiologii*

D-penicylamina jako ligand dla półprzewodnikowych nanokryształów

Nanokryształy półprzewodnikowe to nanocząski mniejsze niż 100 nm charakteryzujące się przerwą energetyczną zależną od rozmiaru cząstki [1][2]. Przykładem półprzewodnikowych nanokryształów są nanopłytki, które budową przypominają płaską kartkę papieru. Dzięki związkom, które je tworzą, oraz wyjątkowej budowie przestrzennej, mają szczególne właściwości optyczne [3]. Nanopłytki należą do struktur, w których ruchy nośników ładunku ograniczone są w jednym wymiarze [4]. W celu uzyskania nowych właściwości, oraz możliwości wykorzystania np. w układach biologicznych, nanopłytki można poddać modyfikacjom powierzchniowym. Adaptacje umożliwiające nanostrukturom przeniesienie ze środowiska hydrofobowego do środowiska hydrofilowego to proces funkcjonalizacji [5]. D-penicylamina jest wykorzystywana do funkcjonalizacji nanocząstek jako ligand, ze względu na mały rozmiar, nietoksyczność, dwubiegunowość i biokompatybilność. Przyłączenie d-penicylaminy do nanopłytek nadaje im charakter hydrofilowy [6].

Bibliografia

1. Misiewicz J., Podemski P., 2008, Optyka struktur półprzewodnikowych. *Wrocław: Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej.*
2. Burt J. L., 2005, Beyond Archimedean solids: star polyhedral gold nanocrystals, *Journal of crystal growth*, 285(4), 681-691.
3. Son J. S. i wsp., 2009, LargeScale Soft Colloidal Template Synthesis of 1.4 nm Thick CdSe Nanosheets, *Angewandte Chemie*, 121(37), 6993-6996.
4. Ithurria S. i wsp., 2011, Colloidal nanoplates with two-dimensional electronic structure, *Nature materials*, 10(12), 936-941.
5. Smith A. M. i wsp., 2006, A systematic examination of surface coatings on the optical and chemical properties of semiconductor quantum dots, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 8(33), 3895-3903.
6. Tamang S., 2011, Synthèse et fonctionnalisation des nanocristaux émettant dans le proche infrarouge pour l'imagerie biologique, *Doctoral dissertation, Grenoble*.

Imię i nazwisko: Filip Formalik

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Zakład Inżynierii Bioprocesowej i Biomedycznej

Opiekun naukowy: prof. dr hab. inż. Bogdan Kuchta, dr Michael Fischer

Dyfuzja alkenów w nanoprowatych polimerach koordynayjnych z centrami metalicznymi

Materiały typu Metal Organic Framework (MOF), będące częścią większej grupy – polimerów koordynacyjnych, w ostatnich czasach przyciągają coraz większą uwagę środowisk naukowych i przemysłowych ze względu na swoje możliwe zastosowania w procesach magazynowania gazów, separacji oraz katalizie. Niezwykłe właściwości adsorpcyjne tych struktur mogą pomóc w rozwoju technologii przechwytywania oraz składowania gazów takich jak wodór, metan czy acetylen. Wyjątkowo interesujący jest przykład cząsteczek etenu ze względu niebezpieczeństwa, które niosą za sobą klasyczne metody kompresji tego gazu.

Z użyciem powszechnie znanej metody Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) oraz dynamiki molekularnej (MD) zbadane zostało zjawisko adsorpcji oraz dyfuzji cząsteczki C_2H_{2-} w Cu-1,3,5-benzenotrikarboksylatu (CuBTC) powstającym poprzez syntezę kwasu benzenotrikarboksylowego oraz soli miedzi. Do opisu oddziaływań między cząsteczkami został użyty model Universal Force Field (UFF) [3] w dwóch wariantach – z oddziaływaniami Coulombowskimi oraz bez nich. Dodatkowo przetestowano zmodyfikowany UFF z dodanymi pozadiagonalnymi członami oddziaływań van der Waalsa (członami obliczonymi explicite, bez użycia reguł mieszania Lorentza-Berthelota) [1].

Uwzględnienie pozadiagonalnych członów w polu siłowym UFF pozwoliło bardzo dokładnie odtworzyć wyniki eksperymentalne. Jest to skutkiem uwzględnienia silnych oddziaływań cząsteczek gazów z niewysyconymi centrami metalicznymi w CuBTC, które znacząco zwiększają energię co skutkuje wzrostem zaadsorbowanych cząsteczek. Konsekwencją użycia tego modelu jest również spadek wartości współczynnika dyfuzji przez silniejsze oddziaływania z adsorbentem. Zbadana została również zależność współczynnika dyfuzji D od ilości cząsteczek w porach CuBTC. Pokazano, że wzrost liczby cząsteczek powoduje spadek współczynnika D co zaprzecza pierwotnym doniesieniom literaturowym jednak spełnia przewidywania eksperymentalne.

Bibliografia:

1. Fischer M., Hoffmann F., Froba M., (2010). New Microporous Materials for Acetylene Storage and C-2H2/CO2 Separation: Insight from Molecular Simulations. *The Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry*, nr 11, 2220-222
2. Prabhudesai, S. A., Sharma V. K., Mitra S., Mukhopadhyay R., (2013). Transport of acetylene adsorbed in CuBTC metal organic framework. *The European Physical Journal B,* nr 86, 145
3. Rappe A. K., Casewit C. J., Colwell K. S., Goddard W. A., Skiff W. M. J., 1992. UFF, A Full Periodic Table Force Field for Molecular Mechanics and Molecular Dynamics Simulations. *Journal of the American Chemical Society, nr* 114, 10024-10035

Imię i nazwisko: Hanna Jaroszek

Jednostka naukowa: Instytut Nowych Syntez Chemicznych, Oddział Chemii Nieorganicznej "IChN" w Gliwicach

Opiekun naukowy: dr hab. inż. Piotr Dydo, prof. Pol. Śl.

Transport jonów w procesie elektrodializy z podwójną wymianą

Elektrodializa to proces membranowy, podczas którego jony transportowane są przez półprzepuszczalne membrany pod wpływem działania potencjału elektrycznego. W swojej klasycznej postaci umożliwia zatężanie lub rozcieńczanie wodnych roztworów soli. Kierowanie przepływem jonów za pomocą przyłożonego napięcia oraz membran jonoselektywnych stwarza jednak również możliwość prowadzenia tych reakcji podwójnej wymiany, w których wszystkie składniki układu są dobrze rozpuszczalne. W tej odmianie elektrodializy, zwanej elektrodializą z podwójną wymianą (*metathesis-electrodialysis*, ED-M), zastosowanie dwóch różnych strumieni substratów prowadzi do otrzymania dwóch różnych strumieni produktów. ED-M może znaleźć zastosowanie do otrzymywania cieczy jonowych[1], materiałów wybuchowych[2] lub soli nawozowych[3].

Na przebieg procesu elektrodializy mają wpływ zarówno warunki prowadzenia procesu (konstrukcja modułu, przyłożony prąd lub napięcie), warunki hydrodynamiczne, oraz właściwości samych membran jonowymiennych, przez które transportowane są zarówno jony, jak i rozpuszczalnik. Do opisu transportu przez membrany jonowymienne często stosuje się rozszerzone równanie Nernsta-Plancka, pozwalające uwzględnić wkład trzech różnych mechanizmów: dyfuzji zachodzącej pod wpływem różnicy stężeń, transportu jonów wywołanego różnicą potencjałów oraz transportu konwekcyjnego (sprzężonego, dragu), w którym jony transportowane są na skutek oddziaływania z pozostałymi składnikami (woda, pozostałe jony) przenikającymi przez membrany ze znaczną szybkością.

Poznanie podstaw fizyko-chemicznych zjawisk transportowych oraz sił napędowych transportu jonów w procesach elektrodializy z podwójną wymianą pozwoli na lepsze zrozumienie procesu oraz na identyfikację czynników limitujących wydajność procesu i czystość produktów. To z kolei pozwoli na dobór warunków prowadzenia procesu dla uzyskania produktów o wymaganej czystości i z dużą wydajnością.

Prezentowane badania są częścią projektu finansowanego ze środków Narodowego Centrum Nauki na podstawie decyzji numer UMO-2013/11/N/ST8/01222

Bibliografia:

1. Haerens K., De Vreese P., Matthijs E., Pinoy L., Binnemans K., Van der Bruggen B., (2012). *Production of ionic liquids by electrodialysis*, Sep. Purif. Technol. nr 97, 90–95.
2. Forquet V., Sabaté C.M., Jacob G., Guelou Y., Delalu H., Darwich C., (2015). *Energetic 2,2-Dimethyltriazanium Salts: A New Family of Nitrogen-Rich Hydrazine Derivatives*, Chem. – An Asian J. nr 10, 1668-1675.
3. Jaroszek H., Lis A., Dydo P., (2016). *Transport of impurities and water during potassium nitrate synthesis by electrodialysis metathesis* Sep. Purif. Technol. nr 158, 87-93.

Imię i nazwisko: Monika Mikulicz

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Podstawowych Problemów Techniki

Opiekun naukowy: Dr inż. Łukasz Radosiński

Badania adsorpcji aspiryny na tlenku krzemu metodą Monte Carlo

Badania rozpoczęto od przeglądu literaturowego, który wykazał, że nie ma obecnie prac naukowych zajmujących się omawianym tematem. Znaleziono prace badające wybraną reakcję metodą DFT oraz dynamiką molekularną, co wykazuje zasadność obliczeń metodą Monte Carlo. W pracy korzystano z narzędzia Adsorption Locator w programie Materials Studio. Jako badany związek wybrano aspirynę ze względu na potencjalne wykorzystanie przeprowadzonych obliczeń oraz otrzymanych wyników w przemyśle farmaceutycznym. Będą one z pewnością pomocne w pracach nad kontrolowanym uwalnianiu leków. Krzem wybrano ze względu na jego właściwości fizykochemiczne i łatwą dostępność. Plan pracy obejmuje obliczenie m.in. ciepła adsorpcji, energii interakcji oraz efektu mikrosolwacji. Prowadzone są również symulacje adsorpcji aminokwasów na badanej powierzchni krzemowej i otrzymane wyniki porównywane są z pochodzącymi z prac: Enantiospecific adsorption of amino acids on hydroxylated quartz (1010) oraz Silica Surface Features and Their Role in the Adsorption of Biomolecules: Computational Modeling and Experiment . Po tym etapie zostaną przeprowadzone obliczenia dla adsorpcji aspiryny w zależności od pH środowiska i przy zastosowaniu różnych forcefield'ów.

Bibliografia:

1. Jeong Woo Han and David S. Sholl (2010) Enantiospecific adsorption of amino acids on hydroxylated quartz (1010).
2. Albert Rimola, Dominique Costa, Mariona Sodupe, Jean-François Lambert, and Piero Ugliengo Silica Surface Features and Their Role in the Adsorption of Biomolecules: Computational Modeling and Experiment

Imię i nazwisko: Roma Musik

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: prof. dr hab. Inż. Szczepan Roszak

Geometric and electronic structure of intermolecular complexes of ethane, methane and nitrogen (C_2H_6*CH_4*N_2) as simple models of components forming atmosphere near Titan's lakes

Titan, the largest of Saturn's moons [1], is nowadays a subject to many scientific studies. They concern composition and structure of surface [2], atmosphere [3,4] haze and lakes on Titan's surface [5]. According to the published results of research [5] the lakes on Titan's surface includes among others hydrogen, nitrogen, methane, carbon monoxide, argon and ethane. Composition of lakes were estimated by direct measurements, using gas chromatography [6] and mass spectrometry [6]. Direct measurements showed that the lakes on Titan's surface includes: ethane (C_2H_6) (76-79%), methane (CH_4) (5-10%), propane (C_3H_8), hydrogen cyanide (HCN) (2-3%), butane (C_4H_8) (1%) and acetylene (C_2H_2) (1%).

The aim of the studies was analysis of the geometrical and electronic structure of complexes that include molecules of ethane, methane and nitrogen with general formula (xC_2H_6 * yCH_4 * zN_2) using computational methods of quantum chemistry. These complexes could be a simple model of components of atmosphere near Titan's lakes. The studies were performed using DFT techniques (Electron Density Functional Theory) with the electron density functionals: m062x elaborated by Truhlar's group [7] and density functionals specially designed for non-covalent interactions: m062x with GD3 correction developed by Grimme [8] and APFD proposed by Pettersson's group [9]. The geometrical structure of complexes with general formula xC_2H_6 * yCH_4 * zN_2 (x= 1, y= 1 or 2, z= 1 or 2) have been optimized and calculated the parameters (E_{int}^{CP}, ΔE_S) characterizing interaction energy. Furthermore, an analysis of electronic structure of the complexes have been performed in real space by means of topological density of electron density (AIM method of Bader [10]). It allowed to determine the critical points of electron density field and describe interatomic interactions that stabilize the complexes. We hope that our study will be useful to further investigations of Titan's atmosphere.

Bibliografia:

1. P. Weissman, L.A. McFadden, T. Johnson, ,,Encyclopedia of the Solar System", Academic Press 1999
2. http://saturn.jpl.nasa.gov/science/index.cfm?SciencePageID=76
3. B. Bezard, ,,Composition and chemistry of Titan's Stratosphere." Phil. Trans. R.Soc. (2009) 367, 683-695
4. V. Vuitton, R.V. Yelle, P. Lavvas, ,,Composition and chemistry of Titan's thermosphere and ionosphere", Phil. Trans. R. Soc. A 2009 367, 729-741
5. D. Cordier, O. Mousis, J.I. Lunine, P. Lavvas, V. Vuitton, ,,AN ESTIMATE OF THE CHEMICAL COMPOSITION OF TITAN's LAKES.'', The Astrophysical Journal, 707:L128–L131, 2009 December 20
6. Mc Ewen, A., et al. 2005, BAAS, 37, 739
7. Y. Zhao, D.G. Truhlar, ,,The M06 suite of density functionals for main group thermochemistry, thermochemical kinetics, noncovalent interactions, excites states, and transition elements: two new functionals and systematic testing of four M06 – class functionals and 12 other functionals",Theor. Chem. Acc., 120(2008) 215-41
8. S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich and H. Krieg, ,,A consistent and accurate ab initio paramemetrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the elements H-Pu," J.Chem. Phys., 132(2010) 154104.
9. A.J. Austin, G. Petersson, M.J. Frisch, F.J. Dobek, G. Scalmani, K. Throssel, ,,A density functional with spherical atom dispersion terms", J. Chem. Theory and Comput., 8(2012) 4989

Imię i nazwisko: Justyna Rogacka

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Zakład Inżynierii Bioprocesowej i Biomedycznej

Opiekun naukowy: prof. dr hab. inż. Bogdan Kuchta

Modelowanie komputerowe oraz chromatografia gazowa w badaniu zjawiska transportu gazów w materiałach porowatych typu MOF

Modelowanie molekularne jest doskonałą metodą do prostego odtworzenia układów rzeczywistych przy wykorzystaniu oprogramowania komputerowego oraz aktualnej wiedzy teoretycznej. Dzięki bardzo dobremu odwzorowaniu wyników eksperymentalnych, możemy obecnie znacznie usprawnić nasze badania oraz obniżyć ich koszty. Ważnym, nie rozwiązanym do tej pory problemem jest uzyskanie tzw. czystej energii, do zastosowań w przemyśle motoryzacyjnym i energetycznym oraz separacja biogazów.

Gazami, które obecnie rozważa się jako gazy energetyczny są wodór oraz biogaz (mieszanina metanu i dwutlenku węgla). Produktem spalania wodoru jest woda, dzięki czemu nie zanieczyszczamy środowiska spalinami. Jednak jako gaz mało ściśliwy, musi być poddawany działaniu wysokiego ciśnienia i niskich temperatur, żeby zebrać go w dużej ilości w zbiorniku. Amerykański Departament ds. Energii podał wymogi dotyczące zbiorników do przechowywania wodoru w samochodach, do 2020 roku powinno to być 5.5 % wag. na 1 kg instalacji do przechowywania. Biogaz jest otrzymywany najczęściej z reakcji fermentacji metanowej, która zachodzi m.in. przy rozkładzie biomasy. Biogaz zawierający dużą ilość CO_2 (55 % wag.) należy uszlachetniać, w związku z czym szuka się dobrych rozwiązań do separacji. Kiedy odseparujemy większość dwutlenku węgla z mieszaniny uzyskujemy zdecydowanie lepszej jakości paliwo.

Hybrydowe materiały metal-organic frameworks (MOF) stanowią obecnie źródło dużych możliwości zarówno aplikacyjnych, jak i rozważań teoretycznych. Badanie zjawiska transportu przy pomocy narzędzi do modelowania molekularnego pozwala na poznanie zjawiska w nanoskali oraz dokładnego opisania oddziaływań między gazami a adsorbentem (MOF). Komplementarną techniką przy badaniu przepływu i separacji gazów jest chromatografia gazowa, dzięki której przy niewielkiej ilości zużytego materiału możemy opisać interesujące nas zjawisko.

Zaprezentowane zostaną metody modelowania molekularnego i chromatografii gazowej, które pozwalają na całościowy zjawiska adsorpcji wodoru na materiałach nanoporowatych.

Acknowledgements:

Praca powstała w wyniku realizacji projektu badawczego o numerze 2015/17/B/ST8/00099 finansowanego ze środków Narodowego Centrum Nauki. Obliczenia zostały wykonane we Wrocławskim Centrum Sieciowo Superkomputerowym, grant Nr 33.

Bibliografia:

1. B. Kuchta, L. Firlej, P. Pfeifer, C. Wexler, Numerical estimation of hydrogen storage limits in carbon -based nanospaces , CARBON 48 (2010) 223 – 231
2. Bueno-Pérez R, García-Pérez E, Gutiérrez-Sevillano JJ, et al (2010) A Simulation Study of Hydrogen in Metal–Organic Frameworks. 8–10.
3. Cacho-Bailo F, Caro G, Etxeberria-Benavides M, et al (2015) High selectivity ZIF-93 hollow fiber membranes for gas separation. Chem Commun 51:11283–11285. doi: 10.1039/C5CC03937A

Imię i nazwisko: Kinga Szkaradek

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr Bartłomiej Szyja

Aktywność katalizatorów metaloporfirynowych w redukcji dwutlenku węgla.

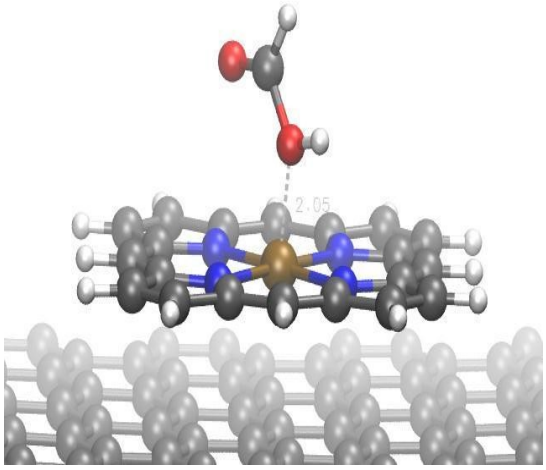
Jednym z najpoważniejszych w skutkach gazów cieplarnianych, a najmniej kompatybilnym w utylizacji, jest ditlenek węgla. Obecne badania nad redukcją tego gazu budzą szerokie zainteresowanie, ze względu na ogromne ilości CO2 w atmosferze oraz pomysł naśladownictwa fotosystemu II zielonych części roślin do jego redukcji.

W omawianym projekcie modelem katalizatora jest porfiryna z centrum metalowym, osadzona na grafenie. Cały model został zoptymalizowany w warunkach periodycznych 19Åx21Åx15Å. Proces elektrokatalityczny założony w reakcji, przebadano dzięki analizie energii poszczególnych stanów przejściowych. Wykorzystano w tym celu oprogramowanie VASP z zaimplementowaną metodą DFT (funkcjonał PBE, cut-off 400 eV).

Wyliczone potencjały reakcji ukazały nadpotencjał dla redukcji dwutlenku węgla do trzech głównych produktów: metanu, metanolu i kwasu mrówkowego. W obliczeniach uwzględniono wartość zerowego punktu energii (ZPE).

Dotychczasowe wyniki dla przeglądu metali w centrum aktywnym makrocykla, wykazały wysoką aktywność do redukcji CO2 w przypadku atomów metali przejściowych: Ru, Mn, Os, Ni. Nie zaobserwowano natomiast aktywności katalitycznej dla żelaza, jak sugerują doniesienia literaturowe.

Mechanizm redukcji dwutlenku węgla do kwasu mrówkowego okazał się być najbardziej preferowanym energetycznie spośród założonych. Założono także redukcję CO2 do metanu i oksydację metanu do metanolu, nie odnotowano jednak możliwości wytworzenia metanolu w takim układzie ze względu na różnice w nadpotencjałach.



Rys. 1. Kwas mrówkowy jako produkt elektroredukcji dwutlenku węgla na katalizorze Ru-porfirynowym.

Bibliografia:

1. Gattrell, M., Gupta, N., & Co, A. (2007). Electrochemical reduction of CO 2 to hydrocarbons to store renewable electrical energy and upgrade biogas. *Energy Conversion and Management*, *48* (4), 1255-1265.

Imię i nazwisko: Jakub Wojciechowski

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: mgr Paweł Woźniak

Correlated mutations as an input for neural networks – residue-residue contact prediction.

There are several methods of de novo protein structure prediction based only on amino acid sequence, the best currentlly avalible method uses Direct Coupling Analysis (DCA)[1], but even them can not provide suficient quality of prediction. In order to improve quality of DCA results artificial neural networks were used to filter out false positive results. We used the information about correlated mutations between groups of amino acids instead of single pairs as an input for the neural network. We show that information about DCA values between residues in groups combined with neural networks can be used to filtration of false positive residue – residue contacts predicted by DCA algorithm.

Bibliografia:

1. Feinauer C, Skwark MJ, Pagnani A, Aurell E (2014) Improving contact prediction along three dimensions. PLoS Comput Biol., 10(10):e1003847.

Imię i nazwisko: Jakub Wojciechowski, Anna Borowska

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny

Opiekun naukowy: dr Łukasz Radosiński

Molecular modeling of biomaterials: structural model of gelatine

Gelatine is biomaterial that can be used in plenty of areas e.g. enzyme immobilisation, controlled drug delivery and regenerative medicine [1]. It can be obtained by hydrolysis of collagen which result is mixture of peptides of different lengths and amino acid sequences. What is more significant number of proline residues are modified what plays important role in stabilizing supramolecular structures [2]. Due to that fact preparation of representative model for molecular simulations was a big challenge. We propose model of gelatine that takes into account amino acid distribution and most important modifications of amino acid, what is more it is smaller than the previous one, so required less computational resources.

Bibliografia:

1. Zaupa, Alessandro, (2011). Physical crosslinking of gelatin: a supramolecular approach to biomaterials.
2. Shoulders MD, Raines RT., (2009). Collagen structure and stability. *Annual review of biochemistry*, nr 78, 929-958.

Imię i nazwisko: Jarosław Zaklika

Jednostka naukowa: Politechnika Wrocławska , Zakład Chemii Fizycznej i Kwantowej

Improvement in analysis of nature of interactions in cathepsin L – inhibitor complex due to optimization of Lennard-Jones parameters

Analysis of interactions within the active site of enzymes is the basis for rational design of novel inhibitors or redesign of the enzyme specificity. The hybrid variational-perturbational method of interaction energy decomposition of Sokalski and Roszak [1] have been used successfully for this task previously [2]. Such analysis requires optimized coordinates of the protein-ligand complex, a task not easily achievable without forcefield parameterization of the ligand.

In an attempt to analyze interactions of cathepsin L with its inhibitors we have found that standard CHARMM Generalized Force Field (CGenFF) approach [3] to generate parameters for organic compounds does not reproduce intermolecular distances with sufficient accuracy, and also that the atomic charges fitted with CGenFF method do not offer an advantage in comparison to charges derived using Merz-Singh-Kollman (MSK) method. An alternative method of optimization of Lennard-Jones parameters with fixed MSK charges is proposed to improve the reproduction of geometry of protein-ligand complexes. Electrostatic component of interaction energies for complexes optimized with this new parametrization procedure better reproduce the ab initio results.

Acknowledgements:

Calculations have been carried out using resources provided by Wroclaw Centre for Networking and Supercomputing (http://wcss.pl), grant No. 249

Bibliography:

1. Sokalski, W.A.; Roszak, S.; Pecul, K. Chem. Phys. Lett. 153(2-3), 1988, 153-159
2. Sokalski, W.A.; Kędzierski, P.; Grembecka, J.; Dziekoński P. i Strasburger, K. "Computational Molecular Biology" Elsevier-Science 1999, 8, 369-396.
3. Vanommeslaeghe K. et al., J. Comput. Chem. 2010, 31, 671-690

SPIS TREŚCI

ORGANIZATORZY 4

PARTNERZY 5

SPONSORZY 6

Iron metalloporphyrins as catalysts in homogenous and electrochemical reduction CO2 by protonation to formic acid 7

Od monomeru heterocyklicznego do polimeru przewodzącego 8

Polimerowe mikro- i nanostruktury fotoczułe 9

Wpływ enzymów na proces warzenia piwa 10

Emisja światła z materiałów grafenowych – rozważania teoretyczne 11

Wykorzystanie modelu molekularnego do monitorowania przebiegu reakcji syntezy peptydów na podłożu stałym 12

Badanie mechanizmu adsorpcji heparyny i jej pochodnych wewnątrz metaloorganicznej struktury MIL-101 13

Modelowanie oddziaływań fosfinodehydrodipeptydów i fosfinodipeptydów w centrum aktywnym ludzkiej aminopeptydazy N 14

Teoretyczne badania abiotycznych prekursorów materii ożywionej 15

Badania fotochemii psoralenów interkalujących DNA 16

Forcefield adaptation for modelling of fluorite crystalline structure 17

Lidocaine- literature review of properties and application 18

Predicting mechanical properties of polyimide/silica nanocomposite based on molecular dynamics simulation method 19

The role of molecular dynamics simulations in drug design 20

D-penicylamina jako ligand dla półprzewodnikowych nanokryształów 21

Dyfuzja alkenów w nanoprowatych polimerach koordynayjnych z centrami metalicznymi 22

Transport jonów w procesie elektrodializy z podwójną wymianą 23

Badania adsorpcji aspiryny na tlenku krzemu metodą Monte Carlo 24

Geometric and electronic structure of intermolecular complexes of ethane, methane and nitrogen (C2H6*CH4*N2) as simple models of components forming atmosphere near Titan's lakes 25

Modelowanie komputerowe oraz chromatografia gazowa w badaniu zjawiska transportu gazów w materiałach porowatych typu MOF 26

SPIS TREŚCI

Aktywność katalizatorów metaloporfirynowych w redukcji dwutlenku węgla. **27**

Correlated mutations as an input for neural networks – residue-residue contact prediction. **28**

Molecular modeling of biomaterials: structural model of gelatine **29**

Improvement in analysis of nature of interactions in cathepsin L – inhibitor complex due to optimization of Lennard-Jones parameters **30**

BANG

BIOCHEMISTRY AND NANOPHYSICS GROUP

Wrocław University of Technology

We did it!