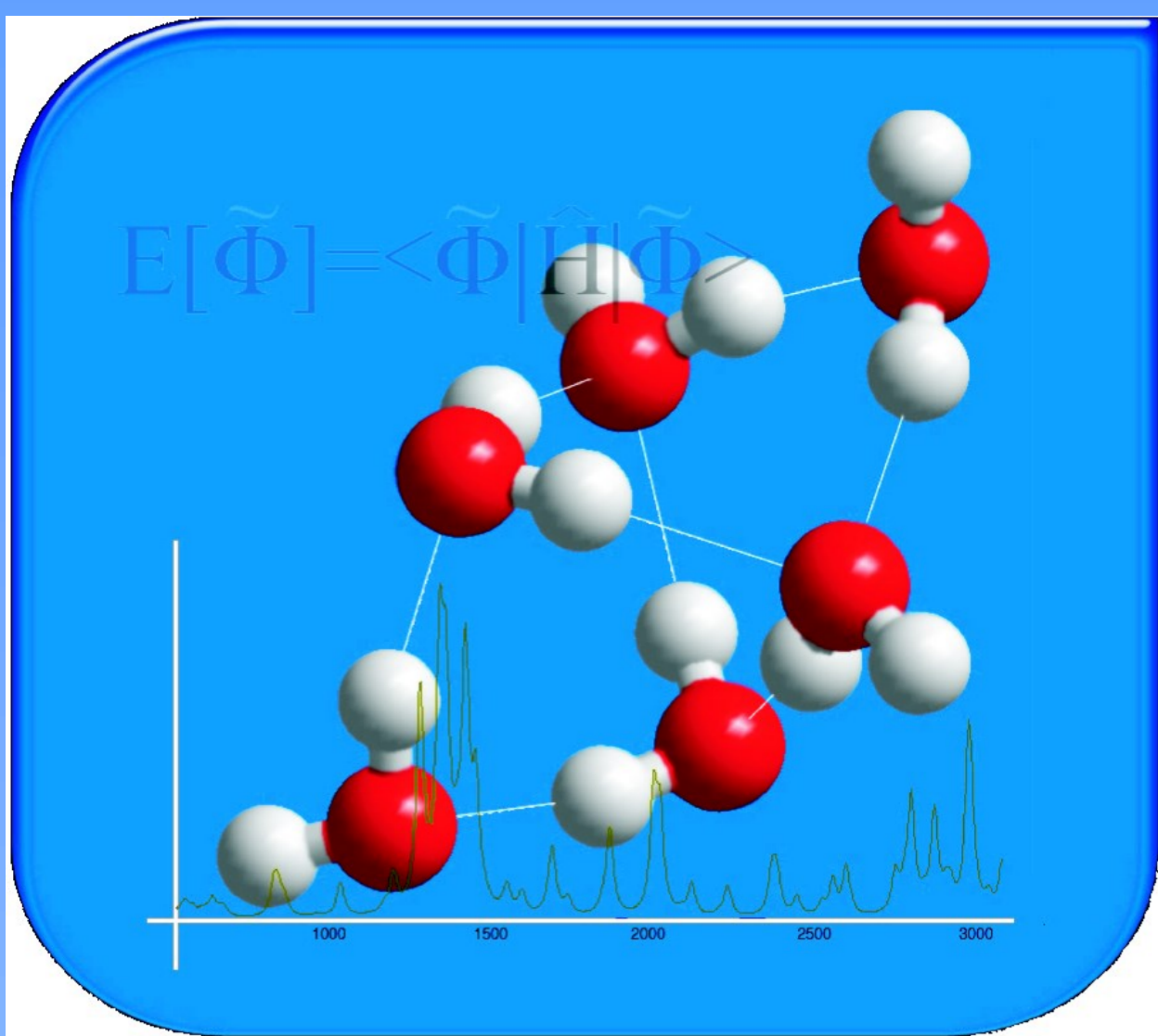


# Pracownia Spektroskopii i Oddziaływań Międzycząsteczkowych



## Informacje ogólne o pracowni

Kierownik Pracowni: **prof. dr hab. Wiktor Koźmiński**

Pracownia składa się z grup badawczych, których kierownikami są:  
**prof. dr hab. W. Dzwolak; prof. dr hab. Wojciech Gadomski; dr hab. Katarzyna Jarzemska;  
prof. dr hab. W. Koźmiński; prof. dr hab. A. Kudelski; prof. dr hab. Barbara Pałys;  
prof. dr hab. M. Pecul-Kudelska; dr hab. Marek Pękała; dr hab. Robert Szoszkiewicz, prof. UW**

Profesorowie emerytowani: prof. dr hab. Jolanta Bukowska, prof. dr hab. Joanna Sadlej



## Źródła finansowania badań

**Kierownik: prof. dr hab. Wojciech Dzwolak**

**Zespół:** Dr Robert Dec;  
Doktoranci: Matylda Waclawska, Marcin Guza, Marcin Witkowski;  
Magistranci / Studenci: Mateusz Fortunka, Mikolaj Stobel, Róża Okoń

1. NCN OPUS UMO-2017/25/B/ST5/02599 „Samorganizacja superstruktur nanowłókien peptydowych kontrolowana poprzez efekt pamięci konformacyjnej” (1.310.000,00 PLN, od 24.01.2018 do 23.01.2021);
2. NCN OPUS UMO-2015/17/B/NZ1/00832 „Ścieżki przemian konformacyjnych i molekularne mechanizmy agregacji amyloidogennego fragmentu H insuliny” (1.386.000,00 PLN, od 18.02.2016 do 17.02.2019).

**Kierownik: prof. dr hab. Wojciech Gadomski**

**Zespół:** Bożena Ratajska-Gadomska, Piotr Piątkowski, Kamil Polok  
Doktoranci: Adam Świętek, Marzena Kaliszewska  
Magistranci: Karolina Skala

1. Projekt Polonium (Narodowa Agencja Wymiany Akademickiej) „Investigation of the structure and dynamics of ionic liquid/molecular solvent mixtures: Application to Dye-Sensitized Solar Cells” - Kierownik projektu: dr Kamil Polok, Okres realizacji: 2019-2021. Projekt realizowany we współpracy z Uniwersytetem w Lille (Francja)
2. Projekt Sonata 13 (Narodowe Centrum Nauki) "Degradacja ogniw słonecznych opartych o organiczno-nieorganiczne trihalogenki ołowiu o strukturze perowskitu pod wpływem elektrod metalicznych.", Kierownik projektu: dr Piotr Piątkowski Okres realizacji: 2018-2021

**Kierownik: prof. dr hab. Wiktor Koźmiński**

**Zespół:** Rafał Augustyniak, Michał Nowakowski, Piotr Paluch, Aleksandra Schukina, Jan Stanek, Anna Zawadzka-Kazmierczak,  
Doktoranci: Paulina Bartosińska-Marzec, Katarzyna Grudzią, Michał Górka (Fizyka)  
Studenci: Bartłomiej Banaś, Paulina Putko, Emilia Staszór, Marlena Sykutowska

1. MAESTRO „Nowe, nieograniczone rozdzielczością, metody i zastosowania spektroskopii NMR”, (2015/18/A/ST4/00270), 2016-21, Wiktor Koźmiński, 3 250 000 zł;
2. NCN OPUS „Badania regulacji allosterycznej hydrolaz SARS CoV-2 z wykorzystaniem metod metyl-TROSY NMR - w poszukiwaniu nowych miejsc wiązania inhibitorów” (2020/37/B/ST4/04017), 2 529 600 zł, W. Koźmiński, 2021-25;
3. POLISH RETURN, PPN/PPO/2018/1/00098/U/00001, Polish National Agency for Academic Exchange, "Nowe metody określenia struktury i dynamiki biomolekuł za pomocą Jądrowego Rezonansu Magnetycznego w ciele stałym z ultraszybką rotacją", J. Stanek, 2019-2022;
4. NCN OPUS 2019/33/B/ST4/02021, Nowe metody Magnetycznego Rezonansu Jądrowego (NMR) w fazie stałej z ultraszybkim wirowaniem pod kątem magicznym i detekcją protonową dla biologii strukturalnej symetrycznych kompleksów białkowych dużych rozmiarów", 999 788 zł, J. Stanek, 2020-2023;
5. NCN Sonata Bis 2020/38/E/ST4/00604, „Zaawansowane metody spektroskopii NMR w badaniach mechanizmu kondensacji chromatyny związanej z przejściami fazowymi białek”, 2 626 790 zł R. Augustyniak, 2021-2026

**Kierownik: prof. dr hab. Andrzej Kudelski**

**Zespół:** Aleksandra Szaniawska, Jan Krajczewski, Agata Królikowska, Beata Wrzosek  
doktoranci: mgr Robert Ambroziak, mgr inż. Edyta Pyrak, mgr Maria Żygielo, mgr Aleksandra Michałowska

1. Grant OPUS NCN, DEC-2019/35/B/ST4/02752 (okres realizacji od 12.08.2020 do 11.08.2025 – planowany termin zakończenia projektu), „Opracowanie nowej metody wykrywania DNA o danej sekwencji przy pomocy powierzchniowo wzmocnionej spektroskopii ramanowskiej”. Przyznane środki: 1 879 560 zł, kierownik projektu: prof. dr hab. Andrzej Kudelski.
2. Grant OPUS NCN, DEC-2017/25/B/ST5/01997 (okres realizacji od 04.04.2018 do 03.04.2022 – planowany termin zakończenia projektu), „Nanorezonatory elektromagnetyczne o silnych właściwościach magnetycznych: nowe materiały do prowadzenia analiz powierzchni przy wykorzystaniu spektroskopii Ramana”. Przyznane środki: 656 200 zł; kierownik projektu: prof. dr hab. Andrzej Kudelski.
3. Grant OPUS NCN, DEC-2018/29/B/ST4/01310 (okres realizacji od 14.01.2019 do 13.01.2023 – planowany termin zakończenia projektu), „Badanie spektroskopowe zmiennych konformacyjnie monowarstw peptydowych związanych z metalem: ku nowym wszechstronnym nanocząstkom optycznym”. Przyznane środki: 929 800 zł; kierownik projektu: dr Agata Królikowska.
4. Grant SONATA NCN, DEC-2020/39/D/ST4/01973 (okres realizacji od 29.10.2021 do 28.10.2024 – planowany termin zakończenia projektu), „Monitorowanie wewnętrzkomórkowego pH przy użyciu techniki SERS”. Przyznane środki: 765 640 zł; kierownik projektu: dr Aleksandra Szaniawska.

**Kierownik: prof. dr hab. Barbara Pałys**

**Zespół:** dr Agnieszka Dąbrowska  
doktoranci: Sylwia Berbeć (obrona w październiku 2021), Mateusz Kasztelan  
Prace magisterskie obronione w 2021: Anna Studzińska, Ewelina Klekotka, Kamil Wysocki, Klaudia Karolak, Małgorzata Kondej  
Prace licencjackie obronione w 2021: Sylwia Rytelewska, Michalis Vasilopoulos, Seweryn Kipa, Agata Bonk

1. Projekt TRI-BIO-CHEM,
2. BST501-D112-64-0185200-38,
3. Mikrogrant IDUB, Nr PSP: 501-D112-20-0001241

**Kierownik: prof. dr hab. Magdalena Pecul-Kudelska**

**Zespół:** Janusz Cukras, Joanna Jankowska  
Doktoranci: Katarzyna Jakubowska

1. Joanna Jankowska, 501-D112-66-0006120, nr UMO-2018/31/D/ST4/02219, pt. "Silnie ukierunkowane fotoprzelączenie w układach molekularnych: pochodzenie, kontrola i zastosowania zjawiska".

**Kierownik: dr hab. Robert Szoszkiewicz, prof. UW**

doktoranci: Saeed Sovizi  
magistranci: Karolina Rotuska, Aleksandra Wosztal, Stanisław Sokolowski  
licencjanci: Tomasz Zdunek

1. NCN, Opus 14: „Mechanistic investigations for local thermal oxidation of thin MoS2 flakes”, 2018-2022.
2. NCN, Harmonia 10: „Influence of surface adsorption on structure and adhesive properties of selected peptide films”, 2019-2023.
3. IDUB, small equipment grant: custom-built single molecule force spectroscopy puller, 2021-2022.
4. IDUB, Nowe Idee, POB II: “New ideas for usage of the TCNL for advanced surface functionalization of graphene derivative and other 2D materials, 2021-2022.”

## Spis prac badawczych zakończonych w 2021 roku

**Kierownik: prof. dr hab. Wojciech Dzwolak**

1. Koliński M, Dec R, Dzwolak W „Multiscale modeling of amyloid fibrils formed by aggregating peptides derived from the amyloidogenic fragment of the A-chain of insulin” Int. J. Mol. Sci. 22 (2021) 12325.
2. Dec R, Pulawski W, Dzwolak W „Selective and stoichiometric incorporation of ATP by self-assembling amyloid fibrils” J. Mater. Chem. B 9 (2021) 8626–8630. [HOT PAPER]
3. Nieznanska H, Boyko S, Dec R, Redowicz M, J. Dzwolak W, Nieznanski K „Neurotoxicity of oligomers of phosphorylated Tau protein carrying tauopathy-associated mutation is inhibited by prion protein” BBA-Mol. Basis Dis. 1867 (2021) 166209.
4. Dec R, Dzwolak W „A tale of two tails: Self-assembling properties of A- and B-chain parts of insulin's highly amyloidogenic H-fragment” Int. J. Biol. Macromol. 186 (2021) 510–518.
5. Zajkowski T, Lee M D, Mondal S S, Carbajal A, Dec R, Brennock P D, Piast R W, Snyder J E, Bense N B, Dzwolak W, Jarosz D F, Rothschild L J “The Hunt for Ancient Prions: Archaeal Prion-Like Domains Form Amyloid-Based Epigenetic Elements” Mol. Biol. Evol. 38 (2021) 2088–2103.
6. Ostermeier L, de Oliveira G A P, Dzwolak W, Silva J L, Winter R “Exploring the polymorphism, conformational dynamics and function of amyloidogenic peptides and proteins by temperature and pressure modulation” Biophys. Chem. 268 (2021) 106506.

**Kierownik: prof. dr hab. Wojciech Gadomski**

1. Bartłomiej Sadowski, Marzena Kaliszewska, Yevgen M. Poronik, Małgorzata Czichy, Patryk Janasik, Marzena Banasiewicz, Dominik Mierzwa, Wojciech Gadomski, Trevor D. Lohrey, John A. Clark, Mieczysław Łapkowski, Bolesław Kozaniewicz, Valentine J. Vullev, Andrzej L. Sobolewski, Piotr Piątkowski, Daniel T. Gryko Potent strategy towards strongly emissive nitroaromatics through a weakly electron-deficient core, Chem. Sci. 12, 14039 (2021), Edge Article, Pick of the week. DOI: 10.1039/D1SC03670J
2. Nishith Maity, Piotr Piątkowski, Kamil Polok, François-Alexandre Mianny Abdenacer Idrissi Effect of the Mixture Composition of BmimBF4–Acetonitrile on the Excited-State Relaxation Dynamics of a Solar-Cell Dye D149: An Ultrafast Transient Absorption Study, J. Phys. Chem. C, 125 (32), 17841–17852 (2021) DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c05008
3. Kamil Polok, Navin Subba, Wojciech Gadomski, Pratik Sen Search for the origin of synergistic solvation in methanol/chloroform mixture using optical Kerr effect spectroscopy, J. Mol. Liq. 345, 117013 (2021) DOI: 10.1016/j.molliq.2021.117013

**Kierownik: prof. dr hab. Wiktor Koźmiński**

1. Tobias Schubeis, Jan Stanek, Guido Pintacuda, Backbone assignment of crystalline E. coli maltose binding protein, Biomolecular NMR Assignments 15, 317-322 (2021)
2. Temperature as an Extra Dimension in Multidimensional Protein NMR Spectroscopy, A. Schukina, P. Malecki, B. Mateos, M. Nowakowski, M. Urbańczyk, G. Kontaxis, P. Kasprzak, C. Conrad-Billroth, R. Konrat and K. Kazmierczak, Chem. Eur. J. 2021, 27, 1753,
3. Structure, Biosynthesis, and Biological Activity of Succinylated Forms of Bacteriocin BacSp222, J. Smialek, M. Nowakowski, M. Bzowska, O. Bocheńska, A. Wilto, A. Kozik, G. Dubin and P. Mak, Int. J. Mol. Sci. 2021, 22, 6256,
4. Golowicz D, Kazmierczak M, Kazmierczak K. Benefits of timeresolved nonuniform sampling in reaction monitoring: The case of aza-Michael addition of benzylamine and acrylamide. Magn Reson Chem. 2021;59:213–220.
5. Hyperphosphorylation of Human Osteopontin and Its Impact on Structural Dynamics and Molecular Recognition, B. Mateos, J. Holzinger, C. Conrad-Billroth, G. Platzer, S. Zerko, M. Sealey-Cardona, D. Anrather, W. Koźmiński, R. Konrat, Biochemistry, 60, Issue 17, 1347 – 1355 (2021)
6. Experimental and computational studies on structure and energetic properties of halogen derivatives of 2-deoxy-D-glucose, M. Ziemiński, A. Zawadzka-Kazmierczak, S. Pawłędzio, M. Maliriska, M. Soltyka, D. Trybiński, W. Koźmiński, S. Skora, R. Zieliński, I. Fokt, W. Priebe, K. Woźniak, B. Pająk, Int. J. Mol. Sci. 2021, 22, 3720 (2021).

**Kierownik: prof. dr hab. Andrzej Kudelski**

1. J. Krajczewski, R. Ambroziak, A. Kudelski, Substrates for surface-enhanced Raman scattering formed on nanostructured non-metallic materials: preparation and characterization. Nanomaterials 11 (2021) 75. IF=5,076
2. J. Krajczewski, R. Ambroziak, A. Kudelski, Photo-assembly of plasmonic nanoparticles: methods and applications. RSC Adv. 11 (2021) 2575. IF=3,361
3. A. Jaworska, K. Malek, A. Kudelski, Intracellular pH – advantages and pitfalls of surface-enhanced Raman scattering and fluorescence microscopy – a review. Spectrochim. Acta A 251 (2021) 119410. IF=4,098
4. A. Szaniawska, A. Kudelski, Applications of SERS in biochemical and medical analysis. Front. Chem. 9 (2021) 664134. IF=5,221
5. A. Michałowska, M. Żygielo, A. Kudelski, Fe3O4-protected gold nanoparticles: New plasmonic-magnetic nanomaterial for Raman analysis of surfaces. Appl. Surf. Sci. 562 (2021) 150220. IF=6,707
6. E. Pyrak, K. Jędrzejewski, A. Szaniawska, A. Kudelski, Attachment of single-stranded DNA to certain SERS-active gold and silver substrates: selected practical tips. Molecules 26 (2021) 4246. IF=4,412
7. M. Pisarek, M. Krawczyk, A. Kosinski, M. Hoidalny, M. Andrzejczuk, J. Krajczewski, K. Bienkowski, R. Solarska, M. Gurgul, L. Zaraska, W. Lisowski, Materials characterization of TiO2 nanotubes decorated by Au nanoparticles for photoelectrochemical applications. RSC Adv. 11 (2021) 38777. IF=3,361
8. M. Żygielo, P. Piotrowski, M. Witkowski, G. Cichowicz, J. Szczytko, A. Królikowska, Reduced self-aggregation and improved stability of silica-coated Fe3O4/Ag SERS-active nanotags functionalized with 2-mercaptoethanesulfonate. Front. Chem. 9 (2021) 697595. IF=5,221
9. P. Piotrowski, M. Witkowski, C. Brosseau, Y. Ozaki, A. Królikowska, Editorial: Novel SERS-active materials and substrates: sensing and (bio)applications. Front. Chem. 9 (2021) 784735. IF=5,221

**Kierownik: prof. dr hab. Barbara Pałys**

1. M. Kasztelan, A. Studzińska, G. Z. Żukowska, B. Pałys, Silver-Graphene Oxide Nanohybrids for Highly Sensitive, Stable SERS Platforms, Frontiers in Chemistry, 2021, 9, 665205
2. M. Kasztelan, A. Stoniewska, M. Gorzkowski, A. Lewera, B. Pałys, S. Żołędek, Ammonia modified graphene oxide - Gold nanoparticles composite as a substrate for surface enhanced Raman spectroscopy, Applied Surface Science, 2021, 554, 149060
3. L. C. Almeida, R. D. Correia, B. Pałys, J. P. Correia, A. S. Viana, Comprehensive study of the electrochemical growth and physicochemical properties of polycatecholamines and polycatechol, Electrochimica Acta, 2021, 386, 138515
4. E. Klekotka, M. Kasztelan, B. Pałys, Factors Influencing the Electrochemical Properties of Graphene Oxide - Gold Nanoparticles Hybrid System, ChemElectroChem, 2021, 8, 3080-3088
5. A. Wadas, A. Gorczyński, I. A. Rutkowska, E. Seta-Właderek, E. Szaniawska, M. Kubicki, A. Lewera, M. Gorzkowski, A. Januszewska, R. Jurczakowski, B. Pałys, V. Patroniak, P. J. Kulesza, Stabilization and activation of Pd nanoparticles for efficient CO2-reduction: Importance of their generation within supramolecular network of tridentate Schiff-base ligands with N,N coordination sites, Electrochimica Acta, 2021, 388, 138550

**Kierownik: prof. dr hab. Magdalena Pecul-Kudelska**

1. Katarzyna Jakubowska, Magdalena Pecul, Nuclear magnetic resonance parameters in Zn2, Cd2 and Hg2 dimers: relativistic calculations, Theoretical Chemistry Accounts, 2021, 140, 26.
2. Janusz Cukras, Joanna Sadlej, Towards Quantum-Chemical Modeling of the Activity of Anesthetic Compounds, International Journal of Molecular Sciences. 2021; 22(17), 9272.
3. Joanna Jankowska, Andrzej L. Sobolewski, Modern Theoretical Approaches to Modeling the Excited-State Intramolecular Proton Transfer: An Overview. Molecules. 2021; 26(17):5140.
4. Joanna Jankowska, Robert W. Góra, Ultrafast nonradiative deactivation of photoexcited 8-oxo-hypoxanthine: a nonadiabatic molecular dynamics study. Phys. Chem. Chem. Phys., 2021, 23, 1234-1241

**Kierownik: dr hab. Robert Szoszkiewicz, prof. UW**

1. R. Szoszkiewicz, Local interactions of atmospheric oxygen with MoS2 crystals, Materials, 14, 5979, 31 pages (2021). <https://doi.org/10.3390/ma14205979>
2. M. Rogala, S. Sokolowski, U. Ukegbu, A. Mierzwa and R. Szoszkiewicz, Direct identification of surface bound MoO3 on single MoS2 flakes heated in dry and humid air, Advanced Materials Interfaces, 2100328, 11 pages (2021); <https://doi.org/10.1002/admi.202100328>
3. M. Rogala, S. Sokolowski, U. Ukegbu, A. Mierzwa and R. Szoszkiewicz, Surface-Bound MoO3 on Single MoS2 Flakes: Direct Identification of Surface Bound MoO3 on Single MoS2 Flakes Heated in Dry and Humid Air (Adv. Mater. Interfaces 13/2021, Front inside cover), Advanced Materials Interfaces, 2170071, 1 page (2021). <https://doi.org/10.1002/admi.202170071>
4. K. Kuczera, R. Szoszkiewicz, J. He and Gouri S. Jas, Length Dependent Kinetics of Alanine-based Helical Peptide Folding from Optimal Dimensionality Reduction. Life, 11(5), 385, 16 pages (2021).