

# Najvýznamnejšie výsledky vedeckej práce za rok 2021

## Základný výskum

### Amyloidná agregácia proteínov – účinok nanočastíc a malých molekúl

**Projekty:** APVV-18-0284, VEGA 2/0176/21, 2/0145/17, (OPII) - ERDF DIAGNAD ITMS2014+ 313011T553, APVV SK-CN-2017-0033, MVTS COST 083/14 action BM1405  
**Riešitelia:** Z. Gažová, A. Antošová, Z. Bednáriková, B. Borovská, M. Gančár, J. Kubacková, J. Marek

V súčasnosti nie sú amyloidné ochorenia liečiteľné, jednou z možností terapie je redukcia množstva amyloidných agregátov pomocou rôznych látok. Zaoberali sme sa štúdiom magnetických nanočastíc (MNPs) obalených citrátom trisódnym, arabskou gumou a kyselinou citrónovou ako aj polymérnych nanosfér dopovaných MNPs s cieľom zistiť ich potenciál inhibovať tvorbu/deštruovať amyloidné agregáty. Zistili sme, že na anti-amyloidný potenciál MNPs a nanosfér má výrazný vplyv ich veľkosť a fyzikálno-chemické vlastnosti podmienené typom jadra a obalu NPs [1, 2]. Okrem toho sme skúmali účinky extraktov rôznych bylín (deriváty sarsapogenínov, tanšínón, kyselina šalvionolová a senosidy) na amyloidnú agregáciu proteínov [3, 4]. Zistili sme, že výrazne redukujú množstvo amyloidných agregátov a niektoré významne indukujú aj rast neuritov. Alzheimerova choroba (ACH) ovplyvňuje množstvo procesov a molekúl v mozgu. Preto sme v práci [5] komplexne študovali účinok takrín-benzotiazolových derivátov na rôzne kaskády ACH. Skúmané deriváty boli schopné inhibovať aktivitu niekoľkých enzýmov spojených s ACH, amyloidnú agregáciu A $\beta$ <sub>42</sub> peptidu a najúčinnjší derivát 10w zlepšil kognitívne vlastnosti u potkanieho modelu [5].

[1] **A. Antosova, M. Gancar, Z. Bednarikova, J. Marek, D. Zahn, S. Dutz, Z. Gazova:** *Surface-modified magnetite nanoparticles affect lysozyme amyloid fibrillization*  
**Biochimica et Biophysica Acta 1865 (2021) 129941, IF = 3.370, Q1P**

[2] **Z. Bednarikova, Y. Antal, M. Kubovcikova, M. Koneracka, V. Girman, V. Zavisova, Z. Gazova:** *Modified polymer nanospheres – Characterization and their anti-amyloid activity to insulin amyloid aggregation*  
**Journal of Magnetism and Magnetic Materials 521 (2021) 167527, IF = 2.993, Q2**

[3] **Z. Bednarikova, M. Gancar, R. Wang, L. Zheng, Y. Tang, Y. Luo, Y. Huang, B. Spodniakova, L. Ma, Z. Gazova:** *Extracts from Chinese herbs with anti-amyloid and neuroprotective activities*  
**International Journal of Biological Macromolecules 179 (2021) 475-484, IF = 6.953, Q1P**

[4] **W. Gao, L. Jin, C. Liu, N. Zhang, R. Zhang, Z. Bednarikova, Z. Gazova, A. Bhunia, H.C. Siebert, H. Dong:** *Inhibition behavior of Sennoside A and Sennoside C on amyloid fibrillation of human lysozyme and its possible mechanism*  
**International Journal of Biological Macromolecules 78 (2021) 424-433, IF = 6.953, Q1**

[5] E. Nepovimova, L. Svobodova, R. Dolezal, V. Hepnarova, L. Junova, D. Jun, J. Korabecny, T. Kucera, **Z. Gazova**, K. Motykova, **J. Kubackova**, **Z. Bednarikova**, J. Janockova, C. Jesus, L. Cortes, J. Pina, D. Rostohar, C. Serpa, O. Soukup, L. Aitken, R.E. Hughes, K. Musilek, L. Muckova, P. Jost, M. Chvojikova, K. Vales, M. Valis, Z. Chrienova, K. Chalupova, K. Kuca: *Tacrine – Benzothiazoles: Novel class of potential multitarget anti-Alzheimets drugs dealing with cholinergic, amyloid and mitochondrial systems*  
**Bioorganic chemistry 107 (2021) 104596, IF = 5.275, Q1**

## Výskum „airglowu“ pomocou techník strojového učenia

**Projekty:** ESA / PECS: SK6-29, ESA / ADO3

**Riešitelia:** Š. Mackovjak, M. Varga

The Earth's upper atmosphere, the thermosphere-ionosphere system, acts as an interface between processes in space and on Earth. It is a very dynamic environment continuously influenced by solar radiation and space weather from above and by atmospheric weather and electrical discharges from below. To describe processes in this interface environment is a very challenging task that requires consideration of a very wide range of phenomena. To overcome this challenge, we have developed a data-driven approach based on state-of-the-art machine learning techniques to model important thermosphere-ionosphere characteristics - airglow radiation [1]. We realized that this data-driven approach might be even more precise if we involve new data that are not commonly available. For this reason, we have developed SCSS-net-one of the most precise model for solar corona structures segmentation based on deep neural networks [2] that allow automatic characterization of solar activity with high temporal and spatial resolution. We have also developed a method for automatic detection of tweek atmospherics, generated by lightning strikes that provide additional information about the state of the lower ionosphere [3].

[1] **Š. Mackovjak, M. Varga**, S. Hrivňak, O. Palkoci, G.G. Didebulidze: *Data-Driven Modeling of Atomic Oxygen Airglow over a Period of Three Solar Cycles*  
**JGR Space Physics 126 (2021), IF = 2.811, Q1P**

[2] **Š. Mackovjak**, M. Harman, V. Maslej-Krešňáková, P. Butka: *Solar corona structures segmentation by deep learning*  
**Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 508 (2021) 3111-3124, IF = 5.287, Q1P**

[3] V. Maslej-Krešňáková, A. Kunderát, **Š. Mackovjak**, P. Butka, S. Jaščur, I. Kolmašová, O. Santolík: *Automatic detection of atmospherics and tweek atmospherics in radio spectrograms based on a deep learning approach*,  
**Earth and Space Science 8 (2021), IF = 2.900, Q1P**

## **Magnetické nanočastice na detekciu nádorových buniek**

**Projekty:** VEGA 2/0033/19, APVV-14-0120, APVV-SK-SRB-18-0055, APVV-DS-FR-19-0052

**Riešitelia:** I. Antal, I. Khmara, M. Koneracká, M. Kubovčíková, V. Závishová

Keďže takmer všetky pevné nádory sú hypoxické, majú zvýšený metastatický potenciál a mnohé sú navyše rezistentné voči chemo/rádioterapii, kľúčovou úlohou v práci [1] bola syntéza magnetických nanočastíc, funkcionalizácia ich povrchu a imobilizácia špecifickej monoklonálnej protilátky, vďaka ktorej sa pripravený biokonjugát nielen špecificky viazal na nádorové bunky, ale bola dokázaná aj jeho internalizácia do nádorových buniek. Konjugovanú protilátku sme testovali aj na 3D modeloch nádorových buniek, ktoré presnejšie vystihujú nádorové mikrosprostredie, a aj na tomto type buniek bola potvrdená nielen špecifická väzba medzi konjugovanou protilátkou a nádorovými bunkami ale aj internalizácia biokonjugátu do 3D sferoidu.

Výsledky výskumu poskytujú sľubný dôkaz zacielenia nádorových buniek so širokým potenciálom pre vizualizáciu a budúcu liečbu nádorov.

[1] **I. Antal, M. Koneracka, M. Kubovcikova, V. Zavisova**, A. Jurikova, **I. Khmara**, M. Omastova, M. Micusik, M. Barathova, L. Jelenska, I. Kajanova, M. Zatovicova, S. Pastorekov: *Targeting of carbonic anhydrase IX-positive cancer cells by glycine-coated superparamagnetic nanoparticles* **Colloids and Surfaces B: Biointerfaces** **205 (2021) 111893**, IF = 5.268, Q1P

## **Vplyv prídavku CeO<sub>2</sub> na štruktúru a supravodivé vlastnosti GdBCO-Ag masívneho monokryštalického supravodiča**

**Projekty:** APVV-17-0625, VEGA 2/0044/19

**Riešitelia:** V. Antal, J. Bednarčík, P. Diko., P. Hajdová, M. Rajňák, V. Kuchárová, M. Radušovská, K. Zmorayová

Masívne monokryštalické supravodiče GdBCO-Ag-Pt vykazujú najvyššie hodnoty zachyteného magnetického poľa (rekordná hodnota 17.6 T pri 26 K) pri zníženej krehkosti vďaka prídavku striebra. Lacnejším variantom tohto masívneho supravodiča je výmena prídavku drahej platiny lacnejším cérom. V predkladanej práci sme skúmali vplyv prídavku 0,4, 1,0 a 1,6 hm. % CeO<sub>2</sub> na štruktúru a supravodivé vlastnosti masívneho monokryštalického supravodiča. GdBCO-Ag-Ce systém sme skúmali metódami termickej analýzy, RTG analýzy, skenovacej elektrónovej a optickej mikroskopie, magnetizačnými meraniami. Ako prví sme ukázali, že pridaný CeO<sub>2</sub> potláča substitúciu bária gadolínium v kryštalovej mriežke Gd(Ba<sub>1-y</sub>Gdy)<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> zlúčeniny a tým zvyšuje kritickú teplotu do supravodivého stavu a reguluje koncentráciu nanorozmerových centier uchytávania magnetických tokočiar. Prídavok céru tak môže

zvýšiť homogenitu teploty prechodu do supravodivého stavu v rámci masívneho monokryštalického supravodiča a optimalizovať kritickú prúdovú hustotu pri vyšších magnetických poliach. Nájdený účinok prídavku CeO<sub>2</sub> na supravodivé vlastnosti GdBCO-Ag masívneho monokryštalického supravodiča je predmetom patentovej prihlášky.

[1] P. Hajdová, P. Diko, M. Rajňák, J. Bednarčík, V. Antal, V. Kuchárová, K. Zmorayová, M. Radušovská: The influence of CeO<sub>2</sub> addition on microstructure and superconducting properties of GdBCO-Ag single grain bulk superconductors.  
**Journal of Alloys and Compounds 889 (2021) 161697, IF = 5.316, Q1P**

### Medzinárodná spolupráca

## **Feronematika – nematické kvapalné kryštály dopované magnetickými nanočasticami**

**Projekt:** VEGA 2/0043/21, MAD SK-HU, APVV-015-0453, MODEX (ITMS2014+:313011T548), beam time at the instrument D33 at the Institut Laue-Langevin, Grenoble, France project No. 9-11-1883

**Riešitelia:** N. Tomašovičová, V. Lacková, M. Baťková, P. Kopčanský, K. Zakuťanská, V. Závišová, J. Kováč, H. Vargová

Práce sú zamerané na štúdium feronematík a ich odozvy na externe magnetické polia. V práci [1] je študovaný vplyv veľkosti a koncentrácie s cieľom nájsť optimálne parametre vhodné pre aplikácie. V práci [2] sme ako prví ukázali možnosť pripraviť kompozit, v ktorom je možné antiferomagnetické alebo feromagnetické počiatočné usporiadanie magnetických nanočastíc, t.j. výsledný magnetický moment systému je nulový alebo saturovaný. Pre študovaný systém bola tiež vypracovaná modifikovaná teória kontinua, ktorá ukázala excelentnú zhodu medzi experimentálne nameranými dátami a teoretickými výsledkami. Práca [3] je významná tým, že sa nám podarilo ako prvým zobrazíť magnetické nanočastice v kvapalnom kryštáli pomocou AFM. Pomocou optických meraní bola popísaná interakcia medzi molekulami kvapalného kryštálu a magnetickými nanočasticami. V práci [4] je študovaný vplyv usporiadania magnetických nanočastíc do klastrov na magnetické vlastnosti kompozitných systémov.

[1] K. Zakuťanská, D. Petrov, P. Kopčanský, D. Węglowska, N. Tomašovičová: *Fréedericksz Transitions in 6CB Based Ferronematics - Effect of Magnetic Nanoparticles Size and Concentration*  
**Materials 14 (2021) 3096, IF = 3.623, Q2**

[2] S. Burylov, D. Petrov, V. Lacková, K. Zakuťanská, N. Burylova, A. Voroshilov, V. Skosar, F. Agresti, P. Kopčanský, N. Tomašovičová: *Ferromagnetic and antiferromagnetic liquid crystal suspensions: Experiment and theory*  
**Journal of Molecular Liquids 321 (2021) 114467, IF = 6.165, Q1**

[3] **N. Tomašovičová, M. Batková, I. Bařko, V. Lacková, V. Zaviřová, P. Kopčanský, J. Jadzyn, P. Salamon, T. Toth-Katona:** *Orientalional self-assembly of nanoparticles in nematic droplets*  
**Nanoscale Advances** **3** (2021) 2777–2781, IF = 4.384, Q1

[4] **V. Lacková, M. Schroer, D. Honecker, M. Hähslor, H. Vargová, K. Zakuřanská, S. Behrens, J. Kováč, D. Svergun, P. Kopčanský, N. Tomašovičová:** *Clustering in ferronematics – The effect of magnetic collective ordering*  
**iScience** **24** (2021) 103493, IF = 5.077, Q1

## **Kvantový magnetizmus a supravodivosť v 3D boridoch**

**Projekt:** APVV-17-0020, DAAD-57561069, VEGA 2/0032/20, VEGA 2/0058/20, EMP H2020-824109, VA SR ITMS2014+ 313011W856

**Rieřitel:** K. Flachbart, S. Gabáni, E. Gažo, J. Kačmarčik, M. Marcin, M. Orendáč, G. Pristáš, P. Farkařovský, M. Rajňák

Súbor troch prác sa zaoberá podrobným experimentálnym a teoretickým štúdiom magnetických a supravodivých vlastností vybraných tetra- a dodeka-boridov. Konkrétne ide o skúmanie: základného stavu a stability zlomkových zdrží geometricky frustrovaného kvantového magnetu  $TmB_4$  so Shastryho-Sutherlandovou mriežkou [1]; nehomogénnej supravodivosti v tuhých roztokoch  $Lu_xZr_{1-x}B_{12}$  ( $0 \leq x \leq 1$ ) [2] a nepružného neutrónového rozptylu spolu s mangetizáciou a tepelnou kapacitou v fcc kvantovom antiferomagnete  $HoB_{12}$  vykazujúcom nábojové dynamické pásy [3].

[1] **M. Orendáč, S. Gabáni, P. Farkařovský, E. Gažo, J. Kačmarčik, M. Marcin, G. Pristáš, K. Siemensmeyer, N. Shitsevalova, K. Flachbart:** *Ground state and stability of the fractional plateau phase in metallic Shastry–Sutherland system  $TmB_4$*   
**Scientific Reports** **11** (2021) 6835, IF = 4.379, Q1

[2] A. Azarevich, A. Bogach, V. Glushkov, S. Demishev, A. Khoroshilov, K. Krasikov, V. Voronov, N. Shitsevalova, V. Filipov, **S. Gabáni, K. Flachbart**, A. Kuznetsov, S. Gavrilkin, K. Mitsen, S. J. Blundell, N. E. Sluchanko: *Inhomogeneous superconductivity in  $Lu_xZr_{1-x}B_{12}$  dodecaborides with dynamic charge stripes*  
**Physical Review B** **103** (2021) 104515, IF = 4.036, Q1

[3] B. Z. Malkin, E. A. Goremychkin, K. Siemensmeyer, **S. Gabáni, K. Flachbart, M. Rajňák**, A. L. Khoroshilov, K. M. Krasikov, N. Yu. Shitsevalova, V. B. Filipov, N. E. Sluchanko: *Crystal-field potential and short-range order effects in inelastic neutron scattering, magnetization, and heat capacity of the cage-glass compound  $HoB_{12}$*   
**Physical Review B** **104** (2021) 134436, IF = 4.036, Q1

## **Súťaž mladých vedeckých pracovníkov ÚEF SAV 2021**

### *I. miesto*

**RNDr. Šimon Mackovjak, PhD.**

Výskum „airglow“ pomocou techník strojového učenia

**RNDr. Zuzana Bednáriková, PhD.**

Amyloidná agregácia proteínov

### *II. miesto*

**RNDr. Michal Rajňák, PhD.**

Štúdium magnetických kvapalín na báze kvapalných dielektrík

**RNDr. Katarína Zakuťanská, PhD.**

Fréederickszové prechody v nematických kvapalných kryštáloch dopovaných magnetickými nanočasticami

### *III. miesto*

**Ing. Petra Hajdová, PhD.**

Príprava, štruktúra a vlastnosti GdBCO masívnych monokryštalických supravodičov

**Mgr. Maksym Karpets**

Study of structure of nanomaterials