

Najvýznamnejšie výsledky vedeckej práce za rok 2023

Základný výskum

Amyloidná agregácia – štúdium aspektov vývoja biomateriálov a inhibítorov

Projekty: VEGA 02/0176/21, VEGA 02/0164/22, APVV-18-0284, APVV SK-TW-21-0004, ITMS: 313011AVG3 “BIOVID”, ITMS 313011AUW7 “NANOVIR”

Riešitelia: A. Antošová, Z. Bednáríková, B. Borovská, D. Fedunová, M. Gančár, Z. Gažová, J. Marek

Súbor prihlásených prác zahŕňa rôzne aspekty vývoja nových biomateriálov s anti-amyloidnou aktivitou nanočastíc a malých molekúl. Najprv sme skúmali vplyv [EMIM⁺] iónových kvapalín (IL) s 5 aniónmi na kinetiku a morfológiu fibrilácie inzulínu. Zistili sme, že zloženie IL má výrazný vplyv na morfológiu vznikajúcich fibríl - zhľuky fibríl alebo tenké, ihlovité štruktúry, čo môže prispieť k tvorbe nových biomateriálov. V ďalších prácach sme sa venovali štúdiu anti-amyloidnej aktivity zložiek zeleného čaju a ich zmesí, a tiež novo-nadizajnovaných cukor obsahujúcich aminokyselín (AK). Epigalokatechín galát je jedinou zložkou čaju s výrazným inhibičným efektom, pričom v zmesiach s ďalšími zložkami je jeho schopnosť nižšia. Pochopenie antagonistického správania sa zmesí môže pomôcť pri vývoji nových liečebných stratégií. Cukrom modifikované AK, ktoré obsahujú aromatické AK sú schopné selektívne deštruovať A β fibrily vyskytujúce sa pri Alzheimerovej chorobe a zároveň majú antioxidantný potenciál. Zlaté nanočastice účinne deštruujú amyloidné fibrily po plazmonickej excitácii, čo ponúka inovatívne stratégie na moduláciu amyloidných ochorení.

[1] V. Vaník, **Z. Bednáríková**, G. Fabriciová, S.S.S. Wang, **Z. Gažová**, **D. Fedunová**: *Modulation of Insulin Amyloid Fibrillization in Imidazolium-Based Ionic Liquids with Hofmeister Series Anions*
International Journal of Molecular Sciences **24** (2023) **9699**, IF = 5.6, Q1P

[2] V. Džupponová, N. Tomášková, **A. Antošová**, E. Sedlák, G. Žoldák: *Salt-Specific Suppression of the Cold Denaturation of Thermophilic Multidomain Initiation Factor 2*
International Journal of Molecular Sciences **24** (2023) **6787**, IF = 5.6, Q1

[3] **M. Gančár**, E. Kurin, **Z. Bednáríková**, **J. Marek**, P. Mucaji, M. Nagy, **Z. Gažová**: *Green tea leaf constituents inhibit the formation of lysozyme amyloid aggregates: An effect of mutual interactions*
International Journal of Biological Macromolecules **242** (2023) **124856**, IF = 8.2, Q1P

[4] M. Tvrdoňová, **B. Borovská**, A. Salayová, R. Rončák, P. Michalčín, **Z. Bednáríková**, **Z. Gažová**: *Design and synthesis of novel carbohydrate-amino acid hybrids and their antioxidant and anti- β -amyloid aggregation activity*
Bioorganic Chemistry **137** (2023) **106636**, IF = 5.3, Q1

[5] E. Cambiotti, **Z. Bednarikova**, **Z. Gazova**, P. Sassi, E. Bystrenova, L. Latterini: *Effect of plasmonic excitation on mature insulin amyloid fibrils*
Colloids and Surfaces B: Biointerfaces **228** (2023) 113434, IF = 5.9, Q1

Geliosphere – paralelizovaný CPU a GPU model modulácie kozmického žiarenia v heliosfére

Projekty: VEGA 2/0077/20, MVTS JEM-EUSO
Riešitelia: P. Bobík

Prezentovaný výsledok je výslednicou širšej snahy o zverejnenie modelu modulácie kozmického žiarenia (KŽ) v heliosfére. Pod zverejnením je mienené zverejnenie softvéru, ktorý bude pri svojom výskume v tejto oblasti používať širšia vedecká komunita. V oblasti kozmického žiarenia v heliosfére, bol verejný len jediný, už neaktualizovaný model SOLARPROP. Napriek desiatkam modelov modulácie KŽ rôznych skupín aktívnych v tejto oblasti, žiadna svoj model nezverejnila. Náš model, nazvaný Geliosphere (G podľa toho, že má aj GPU verziu) je dvojrozmerný SDE model zahŕňajúci driftové procesy v heliosfére. Je presnejší ako SOLARPROP, a dokáže popísať moduláciu KŽ v celej heliosfére, nielen v ekliptike ako SOLARPROP. Článok [1] podrobne opisuje model, ktorý si užívatelia môžu stiahnuť z GitHubu.

[1] M. Solanik, **P. Bobík**, J. Genči: *Geliosphere - parallel CPU and GPU based models of cosmic ray modulation in the heliosphere*
Computer Physics Communications **291** (2023) 108847, IF = 6.3, Q1

Aplikačný výskum

Solvofobicitou spúšťané mezoškálové štruktúry v kvapalných zmesiach a ich potenciál využitia v aplikačnej sfére, patentovaná metóda na skrining hydrofóbných kontaminantov a prototyp zariadenia na aplikáciu tejto metódy

Projekty: VEGA 2/0115/20, VEGA 2/0071/23
Riešitelia: D. Rak, M. Sedlák

Najlepší výsledok v tejto kategórii tvorí monotematický súbor troch výstupov, menovite patent udelený Európskym patentovým úradom [1], publikáciu ktorá vedecky pojednáva o fyzikálno-chemických javoch v pozadí patentovanej metódy [2] a prototyp zariadenia ktorý bol postavený na báze patentovanej metódy [3]. Udelený patent sa týka metódy na meranie obsahu hydrofóbných látok (kontaminantov) vo vodou miešateľných organických kvapalinách [1]. Metóda sa vyznačuje oproti existujúcim riešeniam jednoduchosťou, rýchlosťou, nenáročnosťou z hľadiska financií i obslužného personálu a možnosťou aplikácie i v teréne. Založená je na originálnych vedeckých poznatkoch o

chovaní zmesí so solvofóbnymi komponentmi, kde za určitých podmienok prebieha fázová separácia nie makroskopicky ale mezoskopicky, kde separované komponenty tvoria dobre definované nanodisperzie so zaujímavými vlastnosťami bez nutnosti použitia stabilizátorov (tzv. “zelená chémia”). Okrem nami patentovanej metódy sa črtajú ďalšie možnosti ich aplikačného využitia.

[1] **M. Sedlák, D. Rak:** *A Method for Determination of Content of Hydrophobic Compounds in Water-Miscible Organic Liquids*

European Patent Office, patent number EP3092487, 12.4.2023

[2] **D. Rak, M. Sedlák:** *Solvophobicity-Driven Mesoscale Structures: Stabilizer-Free Nanodispersions*
Langmuir 39 (2023) 1515–1528, IF = 4.0, Q1P

[3] **D. Rak, M. Sedlák:** *prototyp zariadenia na meranie obsahu hydrofóbných látok (kontaminantov) vo vodou miešateľných organických kvapalinách na báze patentovanej metódy [1]*

Funkcionalizované magnetické nanočastice pre bioaplikácie

Projekty: ITMS: 313011AVG3 “BIOVID”, ITMS 313011AUW7 “NANOVIR”, APVV-DS-FR-22-0037; VEGA 02/0049/23; ITMS2014+: 313011T553 “DIAGNAD”

Riešitelia: I. Antal, A. Juríková, I. Khmara, M. Koneracká, M. Kubovčíková, V. Závašová, A. Antošová, Z. Bednáriková, D. Fedunová, M. Gančár, Z. Gažová

Predkladané práce sú zamerané na použitie nanočastíc oxidov železa (MNPs) s funkcionalizovaným povrchom v aplikáciách súvisiacich s COVID-19 (projekty ŠF EÚ). Optimalizácia prípravy silikou modifikovaných nanočastíc, ich charakterizácia a schopnosť viazať a separovať RNA sú popísané v [1]. Bolo zistené, že väzbová afinita MNPs voči RNA a účinnosť separácie závisia od hydrodynamickej veľkosti MNPs. Biologicky najúčinnnejšie boli SiO₂@MNPs so stredným rozmerom 600 nm. S cieľom sledovať distribúciu liečiva v pľúcach pomocou MRI pri syndróme akútnej respiračnej tiesne bol pripravený polylyzínom (PLL) funkcionalizovaný konjugát MNPs s liečivom N-acetylcysteín [2]. Relaxometria ukázala, že konjugát má výborné kontrastné vlastnosti s prevládajúcou pričnou relaxáciou a viditeľnou hypointenzitou MRI signálu. Dostatočne zvýšený MRI kontrast bol pozorovaný aj na vzorkách nanočastíc stabilizovaných oleátom sodným a následne funkcionalizovaných PLL [3]. Zmena relaxačných vlastností MNPs môže pomôcť pri monitorovaní uvoľňovania liečiva *in vitro/in vivo*.

[1] **Z. Bednáriková, M. Kubovčíková, I. Antal, A. Antošová, M. Gančár, J. Kováč, R. Sobotová, V. Girman, D. Fedunová, M. Koneracká, Z. Gažová, V. Závašová:** *Silica-magnetite nanoparticles: Synthesis, characterization and nucleic acid separation potential*
Surfaces and Interfaces 39 (2023) 102942, IF = 6.2, Q1P

[2] **M. Kubovčíková, R. Sobotová, V. Závašová, I. Antal, I. Khmara, M. Lisnichuk, Z. Bednáriková, A. Juríková, O. Štrbák, J. Vojtová, P. Mikolka, J. Gombos, A. Lokajová, Z. Gažová, M. Koneracká:** *N-Acetylcysteine-Loaded Magnetic Nanoparticles for Magnetic Resonance Imaging*
International Journal of Molecular Sciences 24 (2023) 11414, IF = 5.6, Q1P

[3] I. Antal, O. Štrbák, V. Závíšová, J. Vojtová, M. Kubovčíková, A. Juríková, I. Khmara, V. Girman, R. Džunda, K. Kovaľ, M. Koneřacká: *Development of positively charged poly-L-lysine magnetic nanoparticles as potential MRI contrast agent*
Nanomaterials-Basel 13 (2023) 1831, IF = 5.3, Q1P

Medzinárodná spolupráca

Štúdium kvantových efektov v grafitu a 2D systémoch

Projekty: APVV-SK-CZ-RD-21-0114, FLAG ERA JTC 2021 2DSOTECH, EU H2020 European Microkelvin Platform No. 824109, IMPULZ IM-2021-42, APVV-20-0425, VEGA 2/0058/20, VEGA 1/0105/20

Riešitelia: M. Gmitra, J. Kačmarčík, Z. Pribulová

V práci [1] uvádzame prvú systematickú štúdiu kvantových oscilácií merného tepla s použitím vysokokvalitného prírodného grafitu. Zistili sme, že priesečník Landauovej hladiny s Fermiho energiou vedie k vzniku dvojpíkovej štruktúry v mernom teple, a nie k obvyklému jednému píku pozorovanému pomocou iných metód. Článok [2] sa zaoberá štúdiom multiferoických materiálov $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. Štúdia odhalila, že materiál má charakteristiky feromagnetického usporiadania, ktoré ponúka väčšiu flexibilitu pri kontrole orientácie magnetizácie ako jednej z esenciálnych charakteristík pri návrhu moderných technológií. Štúdiom elektrónovej štruktúry a elektrón-spinovej rezonancie grafitu sme sa zaoberali v práci [3]. Ukázali sme, že spiny injektované kolmou polarizáciou vzhľadom na roviny grafénu majú mimoriadne dlhú dobu života, 100 ns pri izbovej teplote, a extrémna difúzna dĺžka spinu 70 μm cez roviny grafitu naznačuje, že tenké vrstvy grafitu môžu byť vynikajúcimi platformami pre spintrónické aplikácie. Proximálne indukovaná spinovo-orbitálna interakcia v graféne uloženom na monovrstve TaS_2 bola študovaná teoreticky v práci [4]. Výpočty ukázali, že nábojová vlna v TaS_2 má výrazný vplyv na radiálnu zložku spinov diracovských elektrónov, čo je možné využiť pri návrhu spintrónických zariadení využívajúcich kolineárny Rashbov-Edelsteinov efekt pri konverzii náboja na spin. Štrukturálne defekty v TaS_2 boli študované pomocou skenovacej tunelovacej mikroskopie a spektroskopie v práci [5]. Identifikovali sme niekoľko typov defektov, ktoré sme modelovali teoreticky a popísali sme ich charakteristické prejavy v nameranej lokálnej hustote stavov. Štúdia odhalila vzájomnú koreláciu medzi moduláciou náboja kvôli S-defektom a posunom Hubbardových pásov.

[1] Z. Yang, B. Fauqué, T. Nomura, T. Shitaokoshi, S. Kim, D. Chowdhury, Z. Pribulová, J. Kačmarčík, A. Pourret, G. Knebel, D. Aoki, T. Klein, D. K. Maude, Ch. Marcenat, Y. Kohama: *Unveiling the double-peak structure of quantum oscillations in the specific heat*
Nature Communications 14 (2023) 7006, IF = 16.6, Nature Index

[2] J. Krempaský, G. Springholz, S.W. D'Souza, O. Caha, M. Gmitra, A. Ney, C. A. F. Vaz, C. Piamonteze, M. Fanciulli, D. Krieger, J. A. Krieger, T. Prokscha, Z. Salman, J. Minár, J. H. Dil: *Efficient magnetic switching in a correlated spin glass*
Nature Communications 14 (2023) 6127, IF = 16.6, Nature Index

[3] B.G. Márkus, **M. Gmitra**, B. Dóra, G. Csósz, T. Fehér, P. Szirmai, B. Náfrádi, V. Zólyomi, L. Forró, J. Fabian, F. Simon: *Ultralong 100 ns spin relaxation time in graphite at room temperature*
Nature Communications 14 (2023) 2831, IF = 16.6, Nature Index

[4] K. Szalowski, M. Milivojević, D. Kochan, **M. Gmitra**: *Spin-orbit and exchange proximity couplings in graphene/1T-TaS₂ heterostructure triggered by a charge density wave*
2D Materials 10 (2023) 025013, IF = 5.5, Q1

[5] I. Lutsyk, K. Szalowski, P. Krukowski, P. Dabrowski, M. Rogala, W. Kozłowski, M. Le Ster, M. Piskorski, D. A. Kowalczyk, W. Rys, R. Dunal, A. Nadolska, K. Toczek, P. Przybysz, E. Lacinska, J. Binder, A. Wysmolek, N. Olszowska, J.J. Kolodziej, **M. Gmitra**, T. Hattori, Y. Kuwahara, G. Bian, T. Chiang, P. J. Kowalczyk: *Influence of structural defects on charge density waves in 1T-TaS₂*
Nano Research 16 (2023) 11528–11539, IF = 9.9, Q1

Ťažké kvarkónia ako sonda jadrových efektov v interakciách na jadrových terčikoch

Projekty: VEGA 2/0020/22

Riešitelia: J. Nemčík

Farebná priezračnosť a kvantová koherencia predstavujú dva zásadné javy v koherentnej a nekoherentnej elektroprodukcii rôznych stavov ťažkých kvarkónii na jadrových terčikoch. Teoretické štúdium v rámci prístupu farebného dipólu založenom na rigoróznom formalizme Greenových funkcií umožňuje ich korektnú a efektívnu implementáciu. V ultraperiferálnych jadrových zrážkach, gluónové tienenie v oblasti malých hodnôt premennej rapidity a redukované efekty kvarkového tienenia v kinematickej oblasti dopredných a spätných rapidít predstavujú hlavnú príčinu pre modifikáciu jadrových účinných prierezov. Korelácia medzi orientáciou kvark-antikvarkového dipólu a jadrovým parametrom zrážky zásadným spôsobom ovplyvňuje tvar diferenciálneho účinného prierezu ako funkcie predanej priečnej hybnosti. Daná korelácia modifikuje tiež pomer účinných prierezov produkcie radiálne excitovaných a základných stavov kvarkónii a môže byť študovaná experimentálne na budúcich elektrón-iónových zrážkach.

[1] B.Z. Kopelovich, M. Krelina, **J. Nemchik**, I. Popashnikova: *Ultraperipheral nuclear collisions as a source of heavy quarkonia*
Physical Review D 107 (2023) 054005, IF = 5, Q1P

[2] B. Kopelovich, **J. Nemchik**, I. Popashnikova, I. Schmidt: *Unconventional Mechanisms of Heavy Quark Fragmentation*
Universe 9 (2023) 418, IF = 2.9, Q2

**Súťaž mladých vedeckých pracovníkov ÚEF SAV
2023**

I. miesto

Ing. Július Bačkai

Strongly correlated electron systems under extreme conditions

III. miesto

Mgr. Martin Kovalik, PhD.

Magnetic relaxations in $\text{La}_{0.80}\text{Ag}_{0.15}\text{MnO}_{3+\delta}$ nanoparticles

Mgr. Dmytro Miakota

Surface acoustic wave investigation of magnetic nanoparticle size and concentration effect on liquid crystal behaviour