

Anorganická chémia / Anorganic chemistry

Multidentátne ligandy na prípravu magneticky aktívnych komplexov vybraných 3d a 4f prvkov **Multidentate ligands for syntheses of magnetically active complexes of selected 3d and 4f elements**

školiťel/ supervisor: prof. RNDr. Juraj Černák, DrSc. (juraj.cernak@upjs.sk)
forma štúdia / study from: denná / full time

Jednomolekulové magnety (SMM) sa považujú za perspektívne materiály na ukladanie informácií s vysokou hustotou zápisu. V súčasnosti sa v dôsledku uvedeného intenzívne študujú magnetické vlastnosti rôznych komplexov. SMM z chemického hľadiska môžu byť veľmi variabilné a medzi nimi sú obzvlášť zaujímavé komplexy lantanoidov. Jedným zo spôsobov vedúcich ku komplexom vykazujúcim pomalú magnetickú relaxáciu je použitie multidentátnych ligandov, napr. na báze ligandov typu Schiffovej bázy ako O,N-donorov. V rámci navrhovanej práce budú najskôr syntetizované na mieru šité multidentátne ligandy a tie sa následne využijú na syntézu komplexov vybraných 4f prvkov (Ce, Dy, Gd); pre porovnanie budú študované aj analogické komplexy s vybranými 3d prvkami (Mn, Co, Ni). Dôraz sa bude klásť na prípravu látok v podobe monokryštálov. Pripravené komplexy budú charakterizované chemickými a spektroskopickými metódami a budú vyriešené ich kryštálové štruktúry. Výsledky experimentálnych magnetických štúdií budú korelované s výsledkami štruktúrnej analýzy.

Single Molecule Magnets (SMM) are considered as perspective materials for molecule-based information storage. Consequently, at present, the magnetic properties of various complexes are intensively studied. SMMs from chemical point of view can be very variable and among these the lanthanide complexes are especially popular. One way leading to complexes exhibiting slow magnetic relaxation is the use of multidentate ligands, e.g. based on Schiff base type ligands as O,N-donors. Within the proposed thesis first the tailored multidentate ligands will be synthesized and subsequently these will be used for syntheses of complexes of selected 4f elements (Ce, Dy, Gd); for the sake of comparison the analogous complexes with selected 3d elements (Mn, Co, Ni) will be also studied.. Emphasis will be done on the preparation of the compounds in the single crystal form. Prepared complexes will be characterized by chemical and spectroscopic methods, and their crystal structures will be elucidated. Results of experimental magnetic studies will be correlated with the results of structure analyses.

Nanopórovité častice oxidu kremičitého pre cieleňý transport liečiv **Nanoporous silica particles for targeted drug delivery**

školiťel/ supervisor: prof. RNDr. Vladimír Zeleňák, DrSc. (vladimir.zelenak@upjs.sk)
forma štúdia / study from: denná / full time

Dizertačná práca nadväzuje na niekoľkoročný výskum zameraný na vývoj nových inteligentných nosičov liečiv, uvoľňujúcich bioaktívnu látku cieľene, vplyvom fyzikálneho alebo chemického stimulu [1-3]. Téma PhD práce vychádza z tohto základu a koncepcie a jej motívom je navrhnúť, pripraviť a otestovať anorganické pórovité nosiče na báze oxidu kremičitého (siliky), dopravujúce liečivo k rakovinovým bunkám aktívnym cieleňím. Pre tento účel budú nanočastice siliky modifikované ligandami, ktoré vďaka špecifickým interakciám ligand-receptor na povrchu rakovinej bunky umožňujú prednostné viazanie a internalizáciu takýchto systémov v rakovinových bunkách.

The thesis is a follow-up to several years of research focused on the development of new intelligent drug delivery systems releasing bioactive substances in a targeted way by the influence of physical or chemical stimulus [1-3]. The theme of the PhD thesis is based on this knowledge and concept and its motivation is to design, prepare and test inorganic porous carriers based on silica matrix, transporting the drug to cancer cells by active targeting. For this purpose, the silica nanoparticles will be modified with ligands that due to the specific ligand-receptor interactions on the surface of the cancer cell, allow preferential binding and internalization of such systems by cancer cells.

**Koordináčné zlúčeniny Cu(II)/Mn(II) s makrocyclickými ligandami
pre štúdium magnetokalorického javu
Coordination compounds of Cu(II)/Mn(II) with macrocyclic ligands
for the study of the magnetocaloric effect**

školiťel/ supervisor: doc. RNDr. Juraj Kuchár, PhD. (juraj.kuchar@upjs.sk)
forma štúdia / study from: denná / full time

Dizertačná práca nadväzuje na niekoľkoročný výskum zameraný na vývoj nových nízkorozmerných zlúčenín na báze Cu(II) a Mn(II) s makrocyclickými ligandami pre potenciálne využitie v oblasti magnetického chladenia [1,2]. Téma PhD práce vychádza z tohto základu a koncepcie a jej motívom je navrhnúť, pripraviť a otestovať nové spôsoby viazania vyššie uvedených kovov vedúce k alternujúcim reťazcom, ktoré v základnom stave budú vykazovať ferrimagnetický stav s potenciálnym prechodom vplyvom vonkajšieho stimulu do feromagnetického usporiadania. Pre tieto účely bude práca zameraná aj na návrh a prípravu nových makrocyclických ligandov na báze 1,4,8,11-tetraazacyclotetradekán (cyclam) a 1,4,7-triazacyclononán (cyclen). Štúdium magnetických javov sa bude realizovať v spolupráci s Ústavom fyzikálnych vied.

The thesis is a follow-up to several years of research focused on the development of novel low-dimensional compounds of Cu(II) with Mn(II) and macrocyclic ligands for potential use in the field of magnetic cooling [1,2]. The theme of the PhD thesis is based on this knowledge and concept and its motivation is to design, prepare and test new ways of binding the aforementioned metals leading to alternating chains that in the basic state will show a ferrimagnetic state with a potential transition to a ferromagnetic arrangement due to an external stimulus. For these purposes, the work will also focus on the design and preparation of new macrocyclic ligands based on 1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane (cyclam) and 1,4,7-triazacyclononane (cyclen). The study of magnetic phenomena will be carried out in cooperation with the Institute of Physics.

Fyzikálna chémia / Physical chemistry

Vývoj a štúdium hybridných elektród pre elektrochemickú detekciu vírusov **Development and study of hybrid electrodes for electrochemical detection of viruses**

školiťel/ supervisor: Prof. RNDr. Renáta Oriňaková, DrSc. (renata.orinakova@upjs.sk)
forma štúdia / study from: denná / full time

Cieľom práce je štúdium vhodných elektródových materiálov pre vývoj elektrochemických senzorov, ktoré by boli schopné nielen kvalitatívne, ale aj kvantitatívne určiť množstvo vírusových častíc vo vzorke. Ide predovšetkým o vírus SARS-CoV-2 a vírus chrípky. Ďalším cieľom je štúdium efektívnej imobilizácie aptamérov nukleových kyselín na elektródovom povrchu pre špecifickú detekciu vírusových častíc.

The aim of this work is to study the suitable electrode materials for the electrochemical sensors development that would be able not only qualitatively but also quantitatively to determine the amount of virus particles in a sample. It will be primarily the SARS-CoV-2 virus and influenza virus. Next aim is to study the effective immobilisation of nucleic acid aptamers on the electrode surface for the specific detection of viral particles.

Elektrochemická diagnostika civilizačných ochorení **Electrochemical diagnosis of civilization diseases**

školiťel/ supervisor: Prof. RNDr. Renáta Oriňaková, DrSc. (renata.orinakova@upjs.sk)
Konzultant / consultant: RNDr. Ivana Šišoláková, PhD.
forma štúdia / study from: denná / full time

Príprava modifikovaných elektrochemických senzorov pomocou nanočastíc a polymérnej membrány pre stanovenie analytov (inzulínu, glukózy, cholesterolu atď.) ako nový spôsob diagnostiky civilizačných ochorení. Štúdium vplyvu veľkosti, tvaru a distribúcie nanočastíc na stanovenie analytov. Modifikácia povrchu elektrochemických senzorov polymérnymi membránami pre zlepšenie vlastností pripravovaných senzorov. Štúdium morfológie povrchu pripravených senzorov, ich elektrochemická charakterizácia, stanovenie analytických parametrov atď.

Development of nano-modified electrochemical sensors using various metal nanoparticles in combination with polymer membrane for the determination of analytes (insulin, glucose, cholesterol, etc.) as a novel way for civilization diseases diagnosis. Effect of size, shape, and nanoparticles distribution towards analytes oxidation will be studied. Modification of the electrode surface using polymer membranes to improve the electrochemical properties of the prepared sensors. Study of surface morphology of prepared sensors, their electrochemical characterization, determination of analytical parameters, etc.

Príprava a charakterizácia elektródových materiálov pre post-lítium iónové batérie **Preparation and characterization of electrode materials for post-Li ion batteries**

školiťel/ supervisor: doc. RNDr. Andrea Straková Fedorková, PhD. (andrea.fedorkova@upjs.sk)
forma štúdia / study from: denná / full time

Príprava a charakterizácia nových kompozitných materiálov na báze síry s vodivými aditívami ako sú uhlík, grafén, grafén oxid, polypyrol a iné. Takto pripravené materiály budú testované ako katódy pre post-lítium iónové batérie, kde sú ťažké kovy nahradené lacnejšími a ekologickejšími materiálmi. Na štúdium týchto materiálov sa využívajú hlavne elektrochemické metódy ako cyklická voltampérometria, elektrochemická impedančná spektroskopia či galvanostatické nabíjanie/vybíjanie. Hlavným cieľom tohto výskumu je zvýšenie kapacity a účinnosti nových kompozitných materiálov.

Preparation and characterization of new composite materials based on sulfur with conductive additives such as carbon, graphite, graphite oxide, polypyrrole and other. These materials will be tested as new cathodes for post-Li ion batteries where heavy metals are replaced by cheaper and environmentally benign materials. Different electrochemical techniques as cyclic voltammetry, electrochemical impedance spectroscopy or galvanostatic charge/discharge measurements will be used for characterization of as prepared materials. The main goal of this research is to improve the capacity and performance of new composite materials.

Modulácia povrchovej energie bunky cirkulujúceho tumoru ako nástroj inhibície tvorby metastáz
Modulation of surface energy of the circulation tumor cell as a tool of metastasis inhibition formation

školiťel/ supervisor: Prof. RNDr. Andrej Oriňak, PhD. (andrej.orinak@upjs.sk)

forma štúdia / study from: denná / full time

Inhibícia adhézie bunky cirkulujúceho tumoru zabráni vytvoreniu metastáz, ktoré sú príčinou úmrtí 99% pacientov chorých na rakovinu. Zmenou povrchového napätia bunky cirkulujúceho tumoru, naviazaním špecifickej molekuly na receptor membrány, znížime/zvýšime povrchové napätie bunky cirkulujúceho tumoru a tá odumrie bez adhézie na životne dôležitý orgán.

Inhibition of CTC adhesion is formation of metastasis blocked. These are reason that it dies over 99% patients with cancer illness. Modulation of surface energy CTC, binding of specific molecule at receptor of CTC membrane, it decreases/increases surface energy of CTC and this dies without forming metastasis at living important organ.

Štúdium dendigrafov poly-L-lyzínu ako nosiča inzulínu so samovolňovacou funkciou pri vysokej koncentrácii glukózy v krvi

Study of PLL dendigraphs as carrier of insuline with auto-release function when blood glucose is high

školiťel/ supervisor: Prof. RNDr. Andrej Oriňak, PhD. (andrej.orinak@upjs.sk)

forma štúdia / study from: denná / full time

Dendigrafické útvary tvorené poly-L-lyzínom sú vhodnou štruktúrou byť nosičom inzulínu. Sú odolné žalúdočnému obsahu a môžu byť podané ústami. Keď sa zvýši koncentrácia glukózy v krvi, štruktúra sa mení a umožňuje uvoľnenie inzulínu do krvi.

Poly-L-Lysine dendigraphs look to be a suitable structure as a insulin carrier. There are stomach content resistant and they can be oral distributed. At glucose increasing content in blood, it acts as auto-release structure.

Analytická chémia / Analytical chemistry

Vývoj nových miniaturizovaných a automatizovaných analytických metód Development of novel miniaturized and automated analytical methods

školiťel/ supervisor: prof. Mgr. Vasil' Andruch, DSc. (vasil.andruch@upjs.sk)

Konzultant / consultant: RNDr. Jana Šandrejová, PhD.

forma štúdia / study from: denná / full time

Téma je zameraná na návrh nových schém, technických a technologických riešení pre miniaturizáciu a automatizáciu analytických procedúr; návrh principiálne nových riešení, ktoré by umožnili prekonať nevýhody a obmedzenia mikroextrakčných techník; vývoj mikroextrakčných procedúr s využitím ultrazvuku a vortexu, a vývoj nových optických/vizuálnych senzorov.

The theme is focused on the design of new schemes, technical and technological solutions for miniaturization and automation of analytical procedures; design of new solutions to overcome disadvantages and limitations microextraction techniques; development of microextraction procedures using ultrasound and vortex, and the development of new optical / visual sensors.