



Lista grantów badawczych

Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak

1. „**Advancing quantum crystallography for better insight into structure and properties of crystals**”, po polsku: „Rozwijając krystalografię kwantową w celu lepszego wejścia w strukturę i właściwości kryształów”, OPUS 16; NCN nu UMO-2018/31/B/ST4/02142, 2 194 600PLN, /01/10/2019 r. - /30/09/2023.
2. „**Phase transitions in minerals induced by pressure and studied by experimental charge densities - feasibility studies**”, po polsku: „Przebiegi fazowe w minerałach indukowane ciśnieniem i badane za pomocą eksperymentalnych rozkładów gęstości elektronowej – studium wykonalności”, OPUS 17; NCN nu DEC-2019/33/B/ST10/02671, 2 543 200PLN, /02/04/2020 - /31/03/2024
3. „**Quantum Crystallographic Quest for New Polymorphic Forms of Ice and Hydrates**”, po polsku: „Kwantowo-krystalograficzne poszukiwania nowych odmian polimorficznych lodu i hydratów”, OPUS 21, NCN nu DEC-2021/41/B/ST4/03010, 3 978 400PLN, 01/03/2022 – 28/02/2026r.
4. „**Infrastructure for Cryoelectron Microscopy and Electron Diffraction Laboratory**”, po polsku: „Infrastruktura dla Laboratorium Kriomikroskopii i Dyfrakcji Elektronowej”, UW IDUB programme, Decision nu BOB-IDUB-622-51/2021, ca. 5 mln PLN,
5. „**Replacement of the CCD detector in single crystal X-ray diffractometer by HyPix-6000HE Hybrid Photon Counting (HPC) detector**”, po polsku: „Wymiana detektora CCD w dyfraktometrze rentgenowskim na hybrydowy detektor zliczający fotony (HPC) HyPix-6000HE”, UW IDUB programme, Decision no: BOB-IDUB-622-29/2021, ca. 500 000 PLN
6. Joint grant z Prof. A. Kutnerem (Pharmacy Department WMU) zatytułowany: „**Development of structures of new vitamin D analogs as potential drugs to improve the effectiveness of standard ovarian cancer therapy**”, po polsku: „Opracowanie struktur nowych analogów witamin D jako potencjalnych leków do poprawy skuteczności standardowej terapii raka jajnika”, IDUB decision: BOB-661-324/2021, 20/07/2021- 30/12/2023, 120 000 PLN
7. **HORIZON-MSCA-2022-DN-01-01, Acronym eRadicate**, Innovative ligands for nuclear receptors to eradicate cancer relapse, grant przyznany w 2023r. lata 2024-2028, Krzysztof Woźniak – wykonawca
8. **SPONSOR RESEARCH AGREEMENT z firmą Moleculin (USA)** dotyczący krystalizacji farmaceutyków, lata 2022-2025, Krzysztof Woźniak, Pldo 28/02/2026. Przyznana kwota: 3 978 400 PLN

Skład osobowy



Kierownik Pracowni
Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak

Pracownicy

- Dr Michał Chodkiewicz
- Dr Roman Gajda
- Dr Tomasz Góral (CeNT UW)
- Dr Saravanan Kandasamy (do grudnia 2023)
- Dr Damian Trzybiński
- Dr Magdalena Woźnińska
- Dr Marcin Ziemiak
- Dr Piotr Rejnhardt
- Dr Sylwia Pawłędzio (do marca 2023)
- Dr Monika Wanat (do kwietnia 2023)
- Dr Marlena Kisiąka
- Dr Barbara Olech (1/2 etatu CeNT)
- Dr Szymon Sutula (1/2 etatu CeNT)
- Mgr Małgorzata Krupska
- Mgr Magdalena Chludzińska

Doktoranci

- Mgr Agnieszka Huć (zatrudniona w granicy)
- Mgr inż. Paulina Marek (WCh PW + WCh UW)
- Mgr inż. Piotr Pacholak (WCh PW + WCh UW)

Studenci

- Maria Wachnicka-Grymuza
- Kacper Gałązka

Tematyka badawcza

Celem większości naszych badań jest znalezienie związku między strukturą wewnętrzną kryształów, właściwościami ilościowymi rozkładów gęstości elektronowej w kryształach, a właściwościami makroskopowymi kryształów (fizycznymi, chemicznymi, farmaceutycznymi, biochemicznymi, etc.), a także rozwój dyfrakcyjnych metod rentgenowskich analizy ciała stałego.

Nasza grupa badawcza:

- rozwija nowe metody krystalografii kwantowej, w szczególności udokładnienie metodą atomów Hirshfelda względem danych rentgenowskich elektronowych i waliduje użyteczność tych metod;
- wykonuje badania strukturalne (oraz badania gęstości elektronowej) kryształów związków organicznych, nieorganicznych i makromolekularnych;
- badamy kryształy związków o znaczeniu farmaceutycznym, ważne związki biologiczne lub biochemiczne, związki chemii supramolekularnej, rotaksany, katenany, kompleksy makrocycliczne jonów metali d i f elektronowych, pochodne kaliksarenów, związki typu gość-gospodarz, minerały i związki nieorganiczne, etc.;
- badamy polimorfizm lodu i hydratów oraz poszukujemy nowych odmian polimorficznych lodu;
- badamy ruchy termiczne atomów i cząsteczek, a także procesy krystalizacji;
- badamy strukturę molekularną i elektronową kryształów pod ciśnieniem;
- badamy naturę przejść fazowych w kryształach pod wysokim ciśnieniem oraz w warunkach zmiennej temperatury.

Większość badań wykonujemy w ramach posiadanych przez nas grantów.

SERDECZNIE ZAPRASZAMY DO WYKONYWANIA PRAC LICENCJACKICH, MAGISTERSKICH I DOKTORSKICH W TEMATYCE GRANTÓW



Nasze doskonale wyposażone laboratorium krystalograficzne



prof. Krzysztof Woźniak podczas odbierania nagrody Ministra Nauki podczas Galii Nauki Polskiej, 18.02.2024 r., Politechnika Warszawska



Barbara Orosz podczas swojej prezentacji doktorskiej "More Accurate Atomic Scattering Factors for Three-Dimensional Electron Diffraction", 14.04.2023 r. - sala Marii Skłodowskiej-Curie, Wydział Chemii, UW



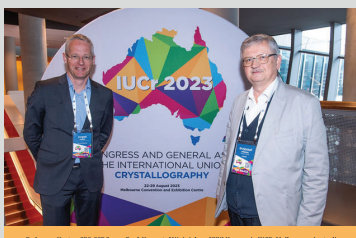
Szymon Sutula z prof. Krzysztofem Woźniakiem (dyplomant Kemię, od lewej) uczestniczący w szkoleniu z zakresu krystalografii, Wydział Chemii, UW



Promocja doktoranta Małgorzaty Krupskiej (z lewej), na obchodach Magisterskich Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak, Rektor UW oraz Promotor doktoranta, Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak



Prof. Krzysztof Woźniak (z lewej) z zespołem badawczym na konferencji Krystalografii w ramach American Crystallographic Association, 10-11 października 2023 r., Houston, Teksas, USA. Od lewej: Krzysztof Woźniak, Magdalena Woźnińska, Barbara Orosz



Jürgen Harter, CEO IUCr oraz Prof. Krzysztof Woźniak na XVII Kongresie IUCr, Melbourne, Australia



mgr Agnieszka Huć, dr Szymon Sutula, dr Piotr Rejnhardt oraz dr Roman Gajda podczas posiedzenia synchrotronowych w DESY, 19-24.04.2023 r., Hamburg, Niemcy



XVII Kongres IUCr w Melbourne, Australia, Od lewej: Mike Glazer (Oxford), Ute Kolb (Maks), Krzysztof Woźniak (UW)



Prof. Krzysztof Woźniak (z lewej) z zespołem badawczym na konferencji Krystalografii w ramach American Crystallographic Association, 10-11 października 2023 r., Houston, Teksas, USA. Od lewej: Krzysztof Woźniak, Magdalena Woźnińska, Barbara Orosz

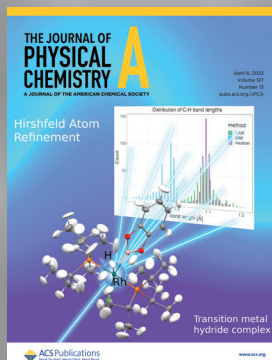
Nasze publikacje naukowe

Lista publikacji naukowych

1. M. Wońska, A. A. Hoser, M. L. Chodkiewicz, K. Woźniak, „Enhancing hydrogen positions in X-ray structures of transition metal hydride complexes with dynamic quantum crystallography”, *IUCr*, 2023, 11, 45-56, doi: 10.1107/S205225252300951X, **IF = 3.9**
2. M. Wońska, S. Pawłędzio, M. L. Chodkiewicz, K. Woźniak, „Hirshfeld Atom Refinement of Metal–Organic Complexes: Treatment of Hydrogen Atoms Bonded to Transition Metals”, *J. Phys. Chem. A*, 2023, 127(13), 3020–3035, https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c06998, **IF = 2.9**
3. M. Wońska, S. Pawłędzio, M. L. Chodkiewicz, K. Woźniak, “Accurate and precise positions of hydrogen atoms bonded to heavy metals”, *Journal of Physical Chemistry, A*, 127(13), 2023, 3020-3035, https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c06998, **IF = 2.9**
4. Y. Xu, M. L. Chodkiewicz, M. Wońska, D. Trzybiński, I. Brekalo, F. Topic, K. Woźniak, M. Arhangel'skis, „Hirshfeld atom refinement of metal–organic frameworks for accurate positioning of hydrogen atoms and disorder analysis”, *Chem. Commun.*, 2023, 59, 8799–8802, DOI: 10.1039/D3CC01369C, **IF = 4.9**
5. E. Hupf, F. Kleemiss, T. Bormann, R. Pal, J. Krzeszczakowska, M. Wońska, D. Jayatilaka, A. Genoni, S. Grabowski, “The Effects of Experimentally Obtained Electron Correlation and Polarization on Electron Densities and Exchange–Correlation Potentials”, *J. Chem. Phys.*, 2023, 158, 124103, https://doi.org/10.1063/5.0138312, **IF = 4.4**
6. K. Jha, F. Kleemiss, M. L. Chodkiewicz, P. M. Dominiak, “Aspherical atom refinements on X-ray data of diverse structures including disordered and covalent organic framework systems: a time-accuracy trade-off”, *J. Appl. Cryst.*, 2023, 56, 116–127, doi: 10.1107/S160057672210883, **IF = 6.1**
7. G. Młostoj, J. Wręczycki, A. Robak, K. Urbaniak, D. Bieliński, M. Palusiak, S. Sutuła, K. Woźniak, H. Heimgartner, “Expeditious sulfuration with elemental sulfur and an unexpected conversion of 2,3-diazacyclopentane-1-thione using tetrabutylammonium fluoride (TBAF) as a source of the fluoride anion”, *Journal of Fluorine Chemistry*, 2023, vol 270, pages or issue 110170, https://doi.org/10.1016/j.jfluchem.2023.110170, **IF = 1.9**
8. P. Rejhardt, M. Daszkiewicz, “Anisotropy of thermal expansion and compressibility of non-centrosymmetric (H3AmG)SiF6”, *Low Temp. Phys.*, 49, 2023, 316–321, https://doi.org/10.1063/1.510017242, **IF = 0.8**
9. P. Rejhardt, J. K. Zareba, A. Katrusiak, M. Daszkiewicz, “Deuteration-Enhanced Negative Thermal Expansion and Negative Area Compressibility in a Three-Dimensional Hydrogen Bonded Network”, *Chemistry of Materials*, 2023, 35 (13), 5160–5167, DOI: 10.1021/acscemater.3c00870, **IF = 8.6**
10. G. Matysczak, S. Sutuła, B. Józwiak, K. Krzewczyk, K. Woźniak, “Study of the Bandgap and Crystal Structure of Cu4TeSe4 Theory vs Experiment”, *Crystals*, 2023, vol 13, pages or issue 331, https://doi.org/10.3390/cryst13020331, **IF = 2.67**
11. M. Witkowski, D. Trzybiński, S. Pawłędzio, K. Woźniak, W. Dzwolak, A. Królkowska, “The Structural Characterisation and DFT-Aided Interpretation of Vibrational Spectra for Cyclo[–Cys-d-Cys] Cyclic Dipeptide in a Solid State”, *Molecules*, 2023, 28(15), 5902, https://doi.org/10.3390/molecules28155902, **IF = 4.6**
12. I. Fokt, M. Cybulski, S. Skora, B. Pajak, M. Ziemiak, K. Woźniak, R. Zielinski, W. Priebe, “D-glucose- and D-mannose-based antimetabolites. Part 4: Facile synthesis of mono- and di-acetates of 2-deoxy-D-glucose prodrugs as potentially useful antimetabolites”, *Carbohydrate Research*, 2023, 108861–108871, https://doi.org/10.1016/j.carres.2023.108861, **IF = 3.1**
13. D. Baranowski, A. Mieczkowski, D. Trzybiński, K. Woźniak, K. Bednarska-Szczepaniak, Z. Gdaniec, Z. J. Leśniowski, “Insights into molecular structure of adenosine-boron cluster conjugates and their phenyl isomers as adenosine receptor ligands: Nuclear magnetic resonance, crystallographic and computational studies”, *Journal Molecular Structure*, 2023, 1274(1), 134588, https://doi.org/10.1016/j.jmolstruc.2022.134588, **IF = 3.8**
14. M. P. Sek, A. Włodek, M. Stachowicz, K. Woźniak, A. Pieczka, “Magnesio-lucheszite from the Kowary vicinity, Karkonosze Mountains, SW Poland: the third occurrence worldwide”, *Mineralogical Magazine*, 87(1), 2023, 60–68, DOI: https://doi.org/10.1180/mgm.2022.114, **IF = 2.131**
15. M. Stachowicz, R. Gajda, J. Parafiniuk, A. Makal, S. Sutuła, P. Fertey, K. Woźniak, “Charge Density Redistribution With Pressure in Hsingohite”, *Scientific Reports*, 13, 2023, 1609, https://doi.org/10.1038/s41598-023-28350-4, **IF = 4.997**
16. J. Skiba, A. Kowalczyk, A. Gorski, N. Dutkiewicz, M. Gapińska, J. Strózek, K. Woźniak, D. Trzybiński, K. Kowalski, “Replacement of the phosphodiester backbone between canonical nucleosides with dirhenium carbonyl “click” linker—a new class of luminescent organometallic nucleoside phosphate mimics”, *Dalton Transactions*, 52, 2023, 1551–1567, DOI: 10.1039/d2dt03995h, **IF = 4.0**
17. A. A. Koryukov, A. I. Stash, A. O. Romanenko, D. Trzybiński, K. Woźniak, A. V. Vologzhanina, “Ligand-receptor interactions of Lamivudine: a view from charge density study and QM/MM calculations”, *Biomedicines*, 11(3), 2023, 743, https://doi.org/10.3390/biomedicines11030743, **IF = 4.7**
18. M. Wierzbicka, A. Abratowska, O. Bemowska-Katubam, D. Panufiluk-Mędrzycka, P. Ważowicz, M. Wróbel, D. Trzybiński, K. Woźniak, “Micro-Evolutionary Processes in Armeria maritima at Metalliferous Sites”, *IJMS*, 24(5), 2023, 4650, https://doi.org/10.3390/ijms24054650, **IF = 5.6**
19. I. Zarzyka, A. Czerwiecka-Kubicka, A. Szyzowska, L. Dobrowolski, W. Gonciarz, M. Chmiela, D. Trzybiński, A. Wódeł, K. Woźniak, K. Heclik, “Molecular Modeling of 3-chloro-3-phenylquinoline-2,4-dione, Crystal Structure and Cytotoxic Activity for developments in a potential new drug”, *J. Mol. Struct.*, 1284, 2023, 135353, https://doi.org/10.1016/j.jmolstruc.2023.135353, **IF = 3.8**
20. P. Lakhani, D. Chodvadiya, P. K. Jha, V. K. Gupta, D. Trzybiński, K. Woźniak, K. J. Kurzydowski, S. Kane, H. Srivastava, C. K. Modi, “DFT stimulation and experimental insights of chiral Cu(II)–salen scaffold within the pocket of MWV-zeolite and its catalytic study”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 25, 2023, 14374–14386, DOI: 10.1039/d3cp00657f, **IF = 3.676**
21. P. H. Marek-Urban, K. A. Urbanowicz, K. Wrochna, P. Pander, A. Blacha-Grzechnik, H. R. V. Berens, K. Woźniak, T. J. Müller, K. K. Durka, “[BiS1]benzothio[1,4]thiaborins as a Platform for BODIPY Singlet Oxygen Photosensitizers”, *Chemistry – A European Journal*, 2023, e202300680, https://doi.org/10.1002/chem.202300680, **IF = 4.3**
22. I. Fokt, M. Cybulski, S. Skora, R. Pajak, M. Ziemiak, K. Woźniak, R. Zielinski, W. Priebe, “D-Glucose- and D-mannose-based antimetabolites. Part 4: Facile synthesis of mono- and di-acetates of 2-deoxy-D-glucose prodrugs as potentially useful antimetabolites”, *Carbohydrate Research* 531, 2023, 108861, https://doi.org/10.1016/j.carres.2023.108861, **IF = 3.1**
23. E. V. Galuskin, M. Stachowicz, I. O. Galuskina, K. Woźniak, Y. Vapnik, M. N. Murashko, G. Zielinski, “Deynokite, CaFe3(PO4)7 – a new mineral of the merrillite group from phosphide-bearing parava contact facies, Hatrurim Complex, Daba Siwaqa, Jordan”, *Mineralogical Magazine*, 2023, published in Sep 2023, DOI: 10.1180/mgm.2023.71, **IF = 2.131**
24. J. Adamek, P. Marek-Urban, K. Woźniak, K. Durka, S. Lulinski, “Highly electron-deficient 3,6-diaza-9-boradifluorene scaffolds for the construction of luminescent chelate complexes” *Chemical Science*, 14, 2023, 12133–12142, DOI: 10.1039/D3SC03876A (Edge Article), **IF = 8.4**
25. K. Durka, A. Zuba, P. H. Marek-Urban, K. Nowicki, J. Drapała, K. Woźniak, S. Lulinski, “Exploring the effect of substitution patterns on the symmetry of hydrogen-bonded supramolecular motifs in functionalized benzoxaboroles”, *CrystEngComm*, 25, 2023, 6329–6342, DOI: 10.1039/D3CE00880K, **IF = 3.1**
26. L. Kumar, K. Leko, V. Nemeč, D. Trzybiński, N. Bregović, D. Cincic, M. Arhangel'skis, “Computational evaluation of halogen-bonded crystals enables prediction of their mechanochemical interconversion reactions”, *Chem. Sci.*, 2023, 14, 3140–3146, DOI https://doi.org/10.1039/D2SC06770E, **IF = 8.4**
27. L. Kumar, S. C. Dash, K. Leko, D. Trzybiński, N. Bregović, D. Cincic, M. Arhangel'skis, “Elucidating mechanochemical reactivity of a ternary halogen-bonded crystal system by computational and calorimetric studies”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2023, 25, 28576–28580, DOI https://doi.org/10.1039/D3CP04358D, **IF = 3.676**

Łącznie 27 publikacji o sumarycznym IF = 112,61

Nasze „Cover Pages”



Wybrane najciekawsze artykuły

