

Uniwersytet Śląski w Katowicach

Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych

Instytut Fizyki im. Augusta Chełkowskiego

dr Przemysław Raczyński

Autoreferat

przedstawiający opis dorobku i osiągnięć naukowych

Katowice 2023

Spis treści

1	Informacje wstępne	4
1.1	Imię i nazwisko	4
1.2	Posiadane dyplomy, stopnie naukowe	4
1.3	Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych	4
2	Publikacje od 2010 roku, po uzyskaniu stopnia doktora	5
2.1	Lista publikacji:	5
3	Wystąpienia na konferencjach naukowych, plakaty	11
3.1	Wystąpienia na konferencjach naukowych	11
3.2	Plakaty prezentowane na międzynarodowych konferencjach naukowych	11
4	Omówienie osiągnięcia naukowego	13
4.1	Tytuł osiągnięcia naukowego	13
4.2	Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe	14
4.3	Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników	16
4.3.1	Motywacja i cel naukowy podjętych badań	16
4.3.2	Omówienie wyników własnych	21
5	Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową, realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej	41
6	Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę	45
6.1	Informacja o działalności dydaktycznej:	45
6.2	Informacja o działalności organizacyjnej	46

7	Inne informacje dotyczące kariery zawodowej	48
7.1	Recenzje artykułów naukowych	48
7.2	Granty obliczeniowe	48
8	Podsumowanie	50
	Bibliografia	50

Rozdział 1

Informacje wstępne

1.1 Imię i nazwisko

Przemysław Czesław Raczyński, ur. 20 maja 1978 w Bytomiu

1.2 Posiadane dyplomy, stopnie naukowe

- rok 2000 - tytuł licencjata na kierunku Fizyka, w zakresie informatyki; Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii
- rok 2002 - tytuł magistra na kierunku Informatyka, Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Techniki
- rok 2008 - stopień naukowy doktora nauk Fizycznych w zakresie Fizyki, Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii

1.3 Informacja o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

- w latach 2010 - 2015: Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii, zatrudniony na stanowisku fizyka
- od roku 2015 do teraz: Uniwersytet Śląski w Katowicach, Wydział Matematyki, Fizyki i Chemii (obecnie Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych), zatrudniony na stanowisku adiunkta (pracownik naukowo-dydaktyczny)

Rozdział 2

Publikacje od 2010 roku, po uzyskaniu stopnia doktora

2.1 Lista publikacji:

- Z. Gburski, K. Gorny i P. Raczynski. “The impact of a carbon nanotube on the cholesterol domain localized on a protein surface”. W: Solid State Communications 150.9-10 (mar. 2010), s. 415–418. issn: 0038-1098. doi: 10.1016/j.ssc.2009.12.005.
- Z. Gburski i P. Raczynski. “Influence of Carbon Nanotube on Cholesterol Lodgment: Molecular Dynamics Simulation”. W: Reviews on Advanced Materials Science 23.1 (mar. 2010). 5th Workshop on Functional and Nanostructured Materials, Lviv, Ukraine, Aug 31 - Sep 06, 2008, s. 64–69. issn: 1606-5131.
- P. Raczynski i Z. Gburski. “Molecular Dynamics and Dielectric Relaxation of Homocysteine Layer Between Graphite Walls - Computer Simulation”. W: Reviews on Advanced Materials Science 23.2 (maj 2010). 5th Workshop on Functional and Nanostructured Materials, Lviv, Ukraine, Aug 31 - Sep 06, 2008, s. 175–179. issn: 1606-5131.
- K. Gorny, Z. Dendzik, P. Raczynski i Z. Gburski. “Dynamic properties of propylene glycol confined in ZSM-5 zeolite matrix - A computer simulation study”. W: Solid State Communications 152.1 (sty. 2012), s. 8–12. issn: 0038-1098. doi: 10.1016/j.ssc.2011.10.020.

- P. Raczynski, K. Gorny, M. Pabiszczak i Z. Gburski. “Nanoindentation of biomembrane by carbon nanotubes - MD simulation”. W: Computational Materials Science 70 (kw. 2013), s. 13–18. issn: 0927-0256. doi: 10.1016/j.commatsci.2012.12.031.
- A. Dawid, P. Raczynski i Z. Gburski. “Depolarised Rayleigh light scattering in argon layer confined between graphite plains: MD simulation”. W: Molecular Physics 112.12 (2014), s. 1645–1650. issn: 0026-8976. doi: 10.1080/00268976.2013.853111.
- P. Raczynski, K. Gorny, A. Dawid i Z. Gburski. “Delivery of nitric oxide to the interior of mammalian cell by carbon nanotube: MD simulation”. W: Archives of Biochemistry and Biophysics 554 (lip. 2014), s. 6–10. issn: 0003-9861. doi: 10.1016/j.abb.2014.04.014.
- P. Raczyński, K. Górny, J. Samios i Z. Gburski. “Interaction Between Silicon–Carbide Nanotube and Cholesterol Domain. A Molecular Dynamics Simulation Study.” W: The Journal of Physical Chemistry C 118 (2014), s. 30115–30119. doi: 10.1021/jp505532f.
- P. Raczyński, K. Górny i Z. Gburski. “Impact of Carbon Nanotube on Homocysteine Clusters: MD Study”. W: Nanocomposites, nanophotonics, nanobiotechnology and applications. T. 156. Springer International Publishing, 2015, s. 165–174. isbn: 978-3-319-06610-3. doi: 10.1007/978-3-319-06611-0.
- K. Górny, P. Raczyński, Z. Dendzik i Z. Gburski. “Odd–Even Effects in the Dynamics of Liquid Crystalline Thin Films on the Surface of Single Walled Carbon and Silicon Carbide Nanotubes: Computer Simulation Study”. W: The Journal of Physical Chemistry C 119 (sierp. 2015), s. 19266–19271. doi: 10.1021/acs.jpcc.5b05961.
- Z. Gburski, M. Pabiszczak, P. Raczyński i V. Raczyńska. “Computer Simulation of Cholesterol Molecules Embedded in High - Density Lipoprotein”. W: Nanoplasmonics, nano-optics, nanocomposites and applications. T. 167. Springer International Publishing, 2015, s. 103–114. isbn: 978-3-319-18542-2. doi: 10.1007/978-3-319-18543-9.
- P. Raczyński, V. Raczyńska i Z. Gburski. “Molecular Dynamics of Thin Mesogene Layer Covering Carbon Nanotube”. W: Nanoplasmonics, nano-optics, nanocomposites and applications. T. 167. Springer International Publishing, 2015, s. 115–124. isbn: 978-3-319-18542-2. doi: 10.1007/978-3-319-18543-9.

- P. Raczynski, V. Raczynska, K. Gorny i Z. Gburski. “Properties of ultrathin cholesterol and phospholipid layers surrounding silicon - carbide nanotube: MD simulations”. W: Archives of Biochemistry and Biophysics 580 (sierp. 2015), s. 22–30. issn: 0003-9861. doi: 10.1016/j.abb.2015.06.008.
- Z. Gburski i P. Raczynski. “Computer Simulations of Homocysteine Molecules Embedded in High - Density Lipoprotein”. W: Nanophysics, nanophotonics, surface studies and applications. T. 183. Springer International Publishing, 2016, s. 313–320. isbn: 978-3-319-30737-4; 978-3-319-30736-7. doi: 10.1007/978-3-319-30737-4_26.
- V. Raczynska, P. Raczynski, K. Gorny i Z. Gburski. “Nanoindentation of DMPC Layer by Nanotubes of Various Diameters”. W: Nanophysics, nanophotonics, surface studies and applications. T. 183. Springer International Publishing, 2016, s. 23–31. isbn: 978-3-319-30737-4; 978-3-319-30736-7. doi: 10.1007/978-3-319-30737-4_3.
- P. Raczynski i Z. Gburski. “Study of the Dynamics of 5CB Thin Layer Placed on the Fullerene Wall: Computer Simulations”. W: Nanophysics, nanophotonics, surface studies and applications. T. 183. Springer International Publishing, 2016, s. 15–21. isbn: 978-3-319-30737-4; 978-3-319-30736-7. doi: 10.1007/978-3-319-30737-4_2.
- P. Raczynski, V. Raczynska i Z. Gburski. “Computer Simulations of the Dynamics of Cholesterol Molecules Located Between Graphene Sheets”. W: Nanophysics, nanomaterials, interface studies and applications. T. 195. Springer International Publishing, 2017, s. 789–797. isbn: 978-3-319-56422-7; 978-3-319-56244-5. doi: 10.1007/978-3-319-56422-7_60.
- P. Raczynski i Z. Gburski. “Molecular Dynamics Simulations of the Dynamics of Small Cholesterol Systems”. W: Nanophysics, nanomaterials, interface studies and applications. T. 195. Springer International Publishing, 2017, s. 595–601. isbn: 978-3-319-56422-7; 978-3-319-56244-5. doi: 10.1007/978-3-319-56422-7_44.
- Z. Gburski, V. Raczynska i P. Raczynski. “Properties of Cholesterol-Fullerene Binary Cluster: MD Simulations”. W: Nanophysics, nanomaterials, interface studies and applications. T. 195. Springer International Publishing, 2017, s. 45–51. isbn: 978-3-319-56422-7; 978-3-319-56244-5. doi: 10.1007/978-3-319-56422-7_4.

- W. Gwizdała, V. Raczyńska, P. Raczyński, K. Górny i Z. Dendzik. “On the Ordering of n-cyanobiphenyl Mesogene Molecules on Graphene - a Computer Simulation Study”. W: *Task Quarterly* 22 (2018), s. 105–111.
- V. Raczyńska, K. Górny, P. Raczyński i Z. Dendzik. “Percolation Threshold of 5-Cyanobiphenyl Mesogene Phases Between Graphene Planes: Computer Simulation Study”. W: *Nanochemistry, Biotechnology, Nanomaterials, and Their Applications*. Springer International Publishing, 2018, s. 289–295. isbn: 978-3-319-92567-7.
- D. Makiela, P. Raczyński i Z. Gburski. “The Dynamics of Water Molecules Confined in the Interior of DMPC Phospholipid Reverse Micelle”. W: *Nanochemistry, Biotechnology, Nanomaterials, and Their Applications*. Springer International Publishing, 2018, s. 89–98. isbn: 978-3-319-92567-7.
- P. Raczynski, K. Gorny, V. Raczynska, M. Pabiszczak, Z. Dendzik i Z. Gburski. “On the impact of nanotube diameter on biomembrane indentation - Computer simulations study”. W: *Biochimica et Biophysica Acta-Biomembranes* 1860.2 (lut. 2018), s. 310–318. issn: 0005-2736. doi: 10.1016/j.bbamem.2017.10.030.
- P. Raczyński, M. Pabiszczak i Z. Gburski. “Interactions Between Carbon - Based Nanostructures and Biomembranes: Computer Simulations Study”. W: *Nanochemistry, Biotechnology, Nanomaterials, and Their Applications*. Springer International Publishing, 2018, s. 277–287. isbn: 978-3-319-92567-7.
- P. Raczyński, K. Górny, Z. Dendzik, J. Samios i Z. Gburski. “Modeling the Impact of Silicon - Carbide Nanotube on the Phospholipid Bilayer Membrane: Study of Nanoindentation and Removal Processes via Molecular Dynamics Simulation”. W: *The Journal of Physical Chemistry C* 123 (2019), s. 18726–18733. doi: doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b05100.
- P. Raczynski. “Properties of Ultrathin Lipid Layers Surrounding Boron Nitride Nanotube: Computer Simulation Study”. W: *Nanophotonics, Nanooptics, Nanobiotechnology, and Their Applications*. Springer International Publishing, 2019, s. 399–408. isbn: 978-3-030-17755-3.
- K. Gorny, V. Raczynska, P. Raczynski, Z. Dendzik i S. Starzonek. “Impact of polarized nanotube surface on ultrathin mesogen film properties: Computer simula-

- tion study”. W: PHYSICAL REVIEW E 99.2 (lut. 2019). issn: 2470-0045. doi: 10.1103/PhysRevE.99.022701.
- M. Pabiszczak, K. Górny, P. Raczynski i Z. Gburski. “Impact of Carbon Nanotubes on HDL-Like Structures: Computer Simulations”. W: Nanocomposites, Nanostructures, and Their Applications. Springer International Publishing, 2019, s. 481–487. isbn: 978-3-030-17759-1.
 - V. Raczyńska, K. Górny, P. Raczynski i Z. Dendzik. “Properties of n-Cyanobiphenyl Nematogene Phases Formed Between Carbon Nanotube Arrays: Computer Simulation Study”. W: Nanophotonics, Nanooptics, Nanobiotechnology, and Their Applications. Springer International Publishing, 2019, s. 409–415. isbn: 978-3-030-17755-3.
 - P. Raczynski, K. Gorny, P. Beldowski, S. Yuwan i Z. Dendzik. “Application of Graphene as a Nanoindenter Interacting with Phospholipid Membranes - Computer Simulation Study”. W: Journal of Physical Chemistry B 124.30 (lip. 2020), s. 6592–6602. issn: 1520-6106. doi: 10.1021/acs.jpcc.0c02319.
 - P. Raczynski, K. Gorny, P. Beldowski, S. Yuwan, B. Marciniak i Z. Dendzik. “Steered Molecular Dynamics of Lipid Membrane Indentation by Carbon and Silicon - Carbide Nanotubes - The Impact of Indenting Angle Uncertainty”. W: Sensors 21.21 (list. 2021). doi: 10.3390/s21217011.
 - P. Beldowski, M. Przybyłek, P. Raczynski, A. Dedinaite, K. Gorny, F. Wieland, Z. Dendzik, A. Sionkowska i P. M. Claesson. “Albumin - Hyaluronan Interactions: Influence of Ionic Composition Probed by Molecular Dynamics”. W: International Journal of Molecular Sciences 22.22 (list. 2021). doi: 10.3390/ijms222212360.
 - Zatwierdzona do publikacji w czasopiśmie Springer praca konferencyjna (konferencja Nanotechnology and nanomaterials 2022, Lwów): P. Raczynski, K. Gorny and Z. Dendzik. ”Self-Sealing Properties Of Phospholipid Membranes After Interactions With Various Nanostructures - Md Study.”
 - Wysłane do recenzji w czasopiśmie Archives of Biochemistry and Biophysics: P. Raczynski, K. Górny, P. Beldowski, B. Marciniak, T. Pöschel, and Z. Dendzik. ”Influence of silicon nanocone on cell membrane self-sealing capabilities for targeted drug delivery - computer simulation study”

- Zatwierdzona do publikacji w czasopiśmie Physical Review E: V. Raczyńska, K. Górny, P. Raczyński, S. Starzonek, Z. Dendzik - niewymieniona w pkt I.2

Rozdział 3

Wystąpienia na konferencjach naukowych, plakaty

3.1 Wystąpienia na konferencjach naukowych

- nazwa konferencji: Nanotechnology and Nanomaterials; rok: 2017; tytuł: Interactions between carbon-based nanostructures and biomembranes – computer simulations study
- Nanotechnology and Nanomaterials; 2018; Properties of ultra-thin lipid layers surrounding boron-nitride nanotube
- The XVth International Conference on Functional and Nanostructured Materials; 2019; Interactions between nanostructures and phospholipid bilayer – MD study
- The XVIIth International Conference on Functional and Nanostructured Materials; 2021; Nanoindentation of biomembranes with carbon-based nanostructures using computer simulation methods; wykład na zaproszenie organizatorów konferencji
- Nanotechnology and Nanomaterials; 2022; Self-sealing properties of phospholipid membranes after interactions with various nanostructures - MD study

3.2 Plakaty prezentowane na międzynarodowych konferencjach naukowych

- nazwa konferencji: Nanotechnology and Nanomaterials; rok: 2013; tytuł: The influ-

ence of silicon decorated nanotube of the properties of cholesterol cluster

- XII International Conference on Molecular Spectroscopy (from Molecules to Nano- and Biomaterials; 2013; Molecular dynamics of thin mesogene layer covering nanotubes
- Nanotechnology and Nanomaterials; 2014; Molecular dynamics of thin mesogene layer covering carbon nanotube
- Nanotechnology and Nanomaterials; 2014; Computer simulation study of the molecular dynamics in homocysteine systems
- Nanotechnology and Nanomaterials; 2015; Study of the dynamics of 5CB thin layer placed on the fullerene wall – computer simulations
- Nanotechnology and Nanomaterials; 2015; Molecular Dynamics simulations of the dynamics of small cholesterol systems
- Nanotechnology and Nanomaterials; 2016; MD simulation of the dynamics of cholesterol molecules located between graphene sheets
- Nanotechnology and Nanomaterials; 2016; Molecular dynamics simulations of the small cholesterol systems

Rozdział 4

Omówienie osiągnięcia naukowego

4.1 Tytuł osiągnięcia naukowego

Wpływ nanostruktur na dwuwarstwę fosfolipidową

4.2 Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe

- P. Raczynski, K. Gorny, M. Pabiszczak i Z. Gburski. “Nanoindentation of biomembrane by carbon nanotubes - MD simulation”. *Computational Materials Science* 70 (kw. 2013), s. 13–18. issn: 0927-0256. doi: 10.1016/j.commatsci.2012.12.031.
- P. Raczyński, K. Górny, J. Samios i Z. Gburski. “Interaction Between Silicon–Carbide Nanotube and Cholesterol Domain. A Molecular Dynamics Simulation Study.” *The Journal of Physical Chemistry C* 118 (2014), s. 30115–30119. doi: 10.1021/jp505532f.
- P. Raczynski, K. Gorny, A. Dawid i Z. Gburski. “Delivery of nitric oxide to the interior of mammalian cell by carbon nanotube: MD simulation”. *Archives of Biochemistry and Biophysics* 554 (lip. 2014), s. 6–10. issn: 0003-9861. doi: 10.1016/j.abb.2014.04.014.
- P. Raczynski, V. Raczynska, K. Gorny i Z. Gburski. “Properties of ultrathin cholesterol and phospholipid layers surrounding silicon - carbide nanotube: MD simulations”. *Archives of Biochemistry and Biophysics* 580 (sierp. 2015), s. 22–30. issn: 0003-9861. doi: 10.1016/j.abb.2015.06.008.
- V. Raczynska, P. Raczynski, K. Gorny i Z. Gburski. “Nanoindentation of DMPC Layer by Nanotubes of Various Diameters”. *Nanophysics, nanophotonics, surface studies and applications*. Springer International Publishing, 2016, T. 183. s. 23–31. doi: 10.1007/978-3-319-30737-4_3.
- P. Raczynski i Z. Gburski. “Molecular Dynamics Simulations of the Dynamics of Small Cholesterol Systems”. *Nanophysics, nanomaterials, interface studies and applications*. Springer International Publishing, 2017, T. 195. s. 595–601. doi: 10.1007/978-3-319-56422-7_44.
- P. Raczynski, K. Gorny, V. Raczynska, M. Pabiszczak, Z. Dendzik i Z. Gburski. “On the impact of nanotube diameter on biomembrane indentation - Computer simulations study”. *Biochimica et Biophysica Acta-Biomembranes* 1860.2 (lut. 2018), s. 310–318. issn: 0005-2736. doi: 10.1016/j.bbamem.2017.10.030.
- P. Raczyński, K. Górny, Z. Dendzik, J. Samios i Z. Gburski. “Modeling the Impact

of Silicon - Carbide Nanotube on the Phospholipid Bilayer Membrane: Study of Nanoindentation and Removal Processes via Molecular Dynamics Simulation”. *The Journal of Physical Chemistry C* 123 (2019), s. 18726–18733.

doi: doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b05100.

- P. Raczynski. “Properties of Ultrathin Lipid Layers Surrounding Boron Nitride Nanotube: Computer Simulation Study”. *Nanophotonics, Nanooptics, Nanobiotechnology, and Their Applications*. Springer International Publishing, 2019, s. 399–408. doi: [10.1007/978-3-030-17755-3_26](https://doi.org/10.1007/978-3-030-17755-3_26).
- P. Raczynski, K. Gorny, P. Beldowski, S. Yuwan i Z. Dendzik. “Application of Graphene as a Nanoindenter Interacting with Phospholipid Membranes - Computer Simulation Study”. *Journal of Physical Chemistry B* 124.30 (lip. 2020), s. 6592–6602. issn: 1520-6106. doi: [10.1021/acs.jpcc.0c02319](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c02319).
- P. Raczynski, K. Gorny, P. Beldowski, S. Yuwan, B. Marciniak i Z. Dendzik. “Steered Molecular Dynamics of Lipid Membrane Indentation by Carbon and Silicon - Carbide Nanotubes - The Impact of Indenting Angle Uncertainty”. *Sensors* 21.21 (list. 2021). doi: [10.3390/s21217011](https://doi.org/10.3390/s21217011).
- Zatwierdzona do publikacji w czasopiśmie Springer praca konferencyjna (konferencja Nanotechnology and nanomaterials 2022, Lwów): P. Raczynski, K. Gorny and Z. Dendzik. ”Self-Sealing Properties Of Phospholipid Membranes After Interactions With Various Nanostructures - Md Study.”
- Wysłane do recenzji w czasopiśmie Archives of Biochemistry and Biophysics: P. Raczynski, K. Gorny, P. Beldowski, B. Marciniak, T. Pöschel, and Z. Dendzik. ”Influence of silicon nanocone on cell membrane self-sealing capabilities for targeted drug delivery - computer simulation study”

4.3 Omówienie celu naukowego ww. prac i osiągniętych wyników

4.3.1 Motywacja i cel naukowy podjętych badań

Nanorurki węglowe (CNT), szczególnie jednościenne, od momentu ich odkrycia, równolegle przez Iijimę w NEC Research Laboratory w Japonii oraz Bethune w IBM Almaden Laboratory w Kalifornii [1–5], cieszą się niesłabnącym zainteresowaniem naukowców. Dzięki ich pracy okazało się, że posiadają one wiele niezwykłych właściwości, dzięki czemu znalazły zastosowanie w wielu obszarach.

Nanorurki węglowe posiadają interesujące właściwości elektryczne. Przewodnictwo CNT jest zarówno funkcją ich średnicy, jak również chiralności. Nanorurki węglowe mogą być albo metaliczne, albo wykazywać cechy półprzewodnika [6]. Przewodnictwo cieplne nanorurek jest bardzo wysokie i postrzega się je jako jedne z najlepszych przewodników cieplnych [7]. Są one elastyczne - można je wydłużać o blisko 20% zanim ulegną zniszczeniu, a ich zgięcie nie powoduje uszkodzeń. Te właściwości uzyskują dzięki strukturze plastra miodu, w której każdy atom węgla jest połączony z trzema sąsiednimi silnymi wiązaniami chemicznymi, co skutkuje posiadaniem przez nie dużego modułu sprężystości. Kiedy jeden z końców nanorurki jest naciskany, wygina się nie powodując uszkodzenia końcówki, a po ustaniu siły odkształcającej wraca do swojego pierwotnego stanu. Ze względu na tę właściwość CNT są wykorzystywane jako końcówki sond w mikroskopii sond skanujących o bardzo wysokiej rozdzielczości [8]. Nanorurki węglowe mają niemalże zerowy współczynnik rozszerzalności cieplnej. Wreszcie, są dobrymi emiternami pola elektronowego. Silne pole elektryczne powstaje na wolnym końcu CNT nawet przy umiarkowanych napięciach. Dzięki tej właściwości naukowcy szybko zdali sobie sprawę, że te emitery polowe mogą być lepsze od tradycyjnych źródeł elektronów, co może znaleźć zastosowanie w np. płaskich wyświetlaczach, które będą o wiele jaśniejsze od tradycyjnych. Wyświetlacze oparte na nanorurkach węglowych wykorzystują pojedyncze działło elektronowe dla każdego piksela na wyświetlaczu [9, 10].

Nanorurki mogą znaleźć zastosowanie jako elektrody w kondensatorach i bateriach, gdyż, jak wspomniano wcześniej, przy odpowiedniej chiralności mają dużą przewodność elektryczną, a oprócz tego dużą powierzchnię. Co ważne, ich geometria sprawia, że ich powierzchnia jest łatwo dostępna dla elektrolitu [11, 12].

Pomysł budowy obwodów elektrycznych na bazie cząsteczek jest istotną częścią nanotechnologii. Szczególnie w nanoskali, połączenia między przełącznikami i innymi urządzeniami aktywnymi stają się coraz bardziej istotne. Nanorurki węglowe są również w tej dziedzinie postrzegane jako bardzo obiecujący kandydaci [13, 14].

Nanorurki są bardzo istotne z punktu widzenia nanotechnologii. Przy średnicy rzędu nanometra można nimi manipulować fizycznie oraz chemicznie w bardzo użyteczny sposób. Znalazły więc zastosowanie w elektronice, materiałoznawstwie, zarządzaniu energią, przetwórstwie chemicznym i wielu innych dziedzinach [15–20].

Pojawia się natomiast pytanie o zastosowanie ich w biologii i medycynie. Jest to rozwijająca się dziedzina, w której nanorurki węglowe mogą również wykazać swój potencjał. Węgiel jest postrzegany jako materiał biokompatybilny, stąd też zainteresowanie CNT. Wykazano wzrost komórek na CNT [21–24], dlatego nie wydaje się, aby były one silnie toksyczne. Zdolność do funkcjonalizowania ścian bocznych CNT daje również podstawy do zastosowań biomedycznych, np. wzrostu i regeneracji neuronów oraz stentów naczyniowych. Wykazano również, że pojedynczą nić DNA można związać z nanorurką, a następnie wprowadzić taki duet do komórki.

Potencjalne zastosowanie nanorurek węglowych w biologii i medycynie stało się motywacją do podjęcia badań naukowych, których celem była odpowiedź na pytanie w jakim stopniu nanorurki węglowe, a później także pokrewne nanostruktury, mogą być postrzegane jako nanokontenery służące dostarczaniu rozmaitych substancji do wnętrza komórki. Jednym z przykładów potencjalnego zastosowania nanostruktur jest terapia celowana molekularnie w leczeniu raka (onkologia precyzyjna).

Terapia celowana molekularnie w onkologii polega na stosowaniu leku skierowanego bezpośrednio przeciwko komórce nowotworowej z określoną zmianą genetyczną. Jest ona bardzo skuteczna, o ile w komórce nowotworowej znajduje się tzw. cel molekularny, czyli konkretnie zmienione białko.

Jak wspomniano powyżej, nanorurki cechuje wysoka odporność mechaniczna. Pojawia się w związku z tym pytanie o możliwość przebicia dwuwarstwy fosfolipidowej przy użyciu CNT i wykorzystanie jej jako kontenera. Dwuwarstwa fosfolipidowa pełni w komórce eukariotycznej funkcję naturalnej i skutecznej bariery odgradzającej wewnątrz komórki od środowiska zewnętrznego, gdyż jest ona nieprzepuszczalna dla prawie wszystkich organicznych i nieorganicznych związków chemicznych występujących w wodzie w warunkach

naturalnych. Jak sugeruje nazwa, składa się ona z dwóch warstw lipidów zwróconych do siebie resztami kwasu tłuszczowego (tzw. ogonami fosfolipidów). Reszty fosforanowe (tzw. głowy fosfolipidów) są natomiast zwrócone na zewnątrz dwuwarstwy. Co ważne, dwuwarstwy są spontanicznie powstającymi i samoorganizującymi się półpłynnymi strukturami. Płynność błony jest uzależniona od ilości molekuł cholesterolu znajdującego się pomiędzy fosfolipidami [25].

Nanorurki wydają się być jednymi z lepszych kandydatów do przebicia dwuwarstwy i dostarczenia substancji również ze względu na swoją niewielką średnicę. Dwuwarstwy mają duże możliwości samoregeneracji, jednak należy pamiętać, że zbyt duża skala jej uszkodzenia jest równoznaczna ze śmiercią komórki. Z tego też powodu nie można próbować przebijać dwuwarstwy zbyt dużym obiektem.

Oprócz homogenicznych nanorurek węglowych, w badaniach użyto również heterogenicznych nanorurek węglowo - krzemowych (SiCNT) [26]. Nanorurki SiCNT, w porównaniu z tymi zbudowanymi tylko z węgla, wykazują większą reaktywność, co może ułatwić ich funkcjonalizację. Najbardziej stabilne nanorurki węglowo - krzemowe mają stosunek węgla do krzemu 1 : 1 [27]. Nanorurki te mogą być także stosowane w elementach magazynujących wodór [28]. Podejmowane są również próby wykorzystania nanorurek węglowo - krzemowych w urządzeniach elektronicznych [29–32] oraz w stomatologii [33].

Opis teoretyczny grafenu datuje się na rok 1947, jednak dopiero na początku lat 80 XX wieku pojawiły się przesłanki mówiące, że można go wytworzyć, co ostatecznie udało się w 2004 roku grupom naukowców z Georgii i Manchesteru. Jest to również materiał o unikalnych właściwościach, który znajduje zastosowanie w coraz to nowych obszarach. Ponieważ znajduje on zastosowanie również w medycynie, istotnym jest zbadanie jego wpływu również na dwuwarstwę fosfolipidową [34]. W odróżnieniu od nanorurek jest to materiał dwuwymiarowy i jego wpływ na błonę, pomimo pewnego podobieństwa do nanorurek, może być zupełnie inny.

Ostatnią strukturą wziętą pod uwagę w prowadzonych badaniach był nanostożek zbudowany z krzemu. Ma on ostrzejszy koniec, w porównaniu do zamkniętej połową fullerenu nanorurki, co może oznaczać bardziej płynne przejście przez dwuwarstwę fosfolipidową, szczególnie w momencie osiągnięcia przez identer sztywnych szkieletów glicerolowych w dwuwarstwie fosfolipidowej.

Sposób nanostruktur wykorzystanych w przeprowadzonych badaniach zdecydowanie naj-

więcej uwagi poświęcono nanorurkom węglowym. Są one bardzo obiecującym materiałem w kontekście celu naukowego i były badane pod tym kątem również przez innych naukowców [35, 36]. Dzięki temu, pomimo pewnych różnic występujących w technice badawczej, np. wszystkie przeprowadzone przeze mnie symulacje są w pełni atomistyczne, istniała możliwość porównania uzyskanych wyników i sprawdzenia poprawności przygotowanego modelu dwuwarstwy fosfolipidowej, nanorurki oraz parametrów symulacji.

Do przebicia dwuwarstwy użyto nie tylko jednego rodzaju nanorurek węglowych. Zbadano wpływ zarówno nanorurki zamkniętej, jak i otwartej [37]. Pozwoliło to oszacować różnice pomiędzy indentacją obiema nanorurkami i podjąć decyzję, czy w dalszych symulacjach można wykorzystywać nanorurki otwarte, których struktura jest łatwiejsza do wygenerowania. Zbadany został również wpływ CNT o różnej średnicy na błonę komórkową [38]. Z jednej strony, w kontekście wykorzystania nanorurek jako kontenerów na substancje, średnica CNT powinna być jak największa. Z drugiej zbyt duża średnica może spowodować nieodwracalne uszkodzenie dwuwarstwy, a w konsekwencji śmierć komórki. Istotne jest więc określenie granicznej, bezpiecznej średnicy indentera.

Zbadano również przypadek nieidealny. W prowadzonych w ramach celu naukowego badaniach, jak również badaniach innych naukowców, rozpatruje się najczęściej przypadek, w którym indenter porusza się prostopadle w kierunku błony. Ponieważ w rzeczywistości jest to przypadek trudny do osiągnięcia, zbadano przypadek indentacji CNT ułożoną pod różnymi kątami względem błony [39].

W przeprowadzonych symulacjach pod uwagę wzięto nie tylko proces indentacji, ale również wycofywania nanostruktur z dwuwarstwy fosfolipidowej. Symulacja składała się zatem z dwóch faz - wbijania i wyciągania nanostruktury z błony. Symulacje procesu ekstrakcji przeprowadzono dla tych samych układów, które wcześniej były indentowane.

Dokładne zbadanie procesu wycofywania nanostruktury z dwuwarstwy fosfolipidowej jest bardzo istotne. Przepychana przez dwuwarstwę nanostruktura bardzo często popycha przed sobą napotkane lipidy. Podczas fazy ekstrakcji pojawia się pytanie o możliwość ponownego wbudowania w strukturę dwuwarstwy wypchniętych wcześniej lipidów. Jeżeli taki proces zachodzi, wiąże się to z większą stabilnością błony, która w tym przypadku ulega mniejszym uszkodzeniom.

Proces wycofywania nanostożka został przeprowadzony z różnych głębokości przebicia błony. Ta część badań dała odpowiedź o korelację pomiędzy głębokością samej indentacji

a stopniem uszkodzenia błony zarówno w procesie indentacji, jak i następującym po nim procesie ekstrakcji.

Po procesach indentacji i wycofywania organizacja błony jest zaburzona, czasami pozostają w jej strukturze znaczne defekty. Jednym z elementów badań było zbadanie możliwości samoregeneracji błony. Im szybciej dwuwarstwa fosfolipidowa się zregeneruje, tym prędzej komórka będzie prawidłowo chroniona przez wpływem środowiska zewnętrznego. Ten temat został w szerszym zakresie opisany w [34], gdyż uszkodzenia spowodowane indentacją przy użyciu warstwy grafenowej okazały się być największe.

Liczba układów modelowanych w ramach celu naukowego jest dość duża. Jednak aby badania były spójne i w jak najszerszym zakresie porównywalne, najważniejsze cechy i parametry symulacji były zbliżone dla każdego badanego systemu.

Jednym z nich jest prędkość przesuwania nanostruktury. W tym przypadku należało znaleźć kompromis pomiędzy ilością atomów w układach (najczęściej pomiędzy 120 - 150 tysięcy), a czasem symulacji. Ostatecznie prędkości te wahają się między 0.5, a 2.5 m/s, co jest dodatkowo zgodne z tymi zaproponowanymi przez [35, 36, 40]. Jedynie w przypadku jednej serii badań prędkości indentacji były większe. Do przemieszczania nanostruktur w układzie użyto techniki Sterowanej Dynamiki Molekularnej (SMD).

Wszystkie badania były przeprowadzone w temperaturze fizjologicznej $\approx 310K$ (w niektórych seriach symulacji uwzględniono także inne), w obecności wody i z krokiem czasowym 0.5 fs. Woda jest konieczna zważywszy na jej ilość w ludzkim organizmie. We wszystkich badaniach użyto tego samego modelu dwuwarstwy, złożonego z fosfolipidów DMPC (1,2-Dimyristoyl-sn-glycero-3-phosphocholine) oraz cholesterolu w proporcjach podawanych w [25]. We wszystkich symulacjach zastosowano pole siłowe typu CHARMM [41, 42] i wszystkie zostały wykonane przy użyciu oprogramowania NAMD [43], stworzonego przez zespół Uniwersytetu w Illinois.

Należy również podkreślić, że wyniki przedstawione w publikacjach są uśrednione po, zwykle, kilkunastu trajektoriach. Dodając do tego wielkości układów oraz fakt, że badania komputerowe były wykonane przy użyciu w pełni atomistycznego modelu, ilość czasu, w których prowadzone były symulacje należy mierzyć w milionach procesorogodzin.

4.3.2 Omówienie wyników własnych

Zagadnienia związane z symulacjami komputerowymi układów molekularnych o znaczeniu biologicznym było również tematem mojej rozprawy doktorskiej zatytułowanej "Badanie dynamiki cholesterolu w otoczeniu fosfolipidów i białek – symulacje komputerowe". Wtedy, przy ograniczonej mocy obliczeniowej symulowane były układy bezwodne, a symulacje nie zawsze były w pełni atomistyczne. Dodatkowo użyty został model molekuly sztywnej. Pomimo tych ograniczeń w końcowej fazie pracy nad doktoratem miały miejsce moje pierwsze symulacje dwuwarstwy fosfolipidowej. W kolejnych latach po uzyskaniu stopnia doktora, nastąpiła zmiana oprogramowania na NAMD, które pozwala prowadzić w pełni atomistyczne symulacje oraz, dzięki wysokiej skalowalności obliczeń, badane układy mogły być uzupełnione o wodę. Zaowocowało to publikacją zatytułowaną "The impact of a carbon nanotube on the cholesterol domain localized on a protein surface" [44], gdzie zbadano wpływ jednościennej nanorurki węglowej na białko śródbłonka (1IQV). Praca ta, podobnie zresztą jak [45], może być traktowana jako swoisty łącznik pomiędzy wykonanymi wcześniej, w ramach doktoratu, symulacjami układów o znaczeniu biologicznym a ich kontynuacją.

Opisującą podobne zagadnienia jak [44], jednak również dla nanorurki heterogenicznej SiCNT, była praca zatytułowana "Interaction Between Silicon–Carbide Nanotube and Cholesterol Domain. A Molecular Dynamics Simulation Study." [46].

Powyższy artykuł w pierwszej części porównuje wyniki uzyskane podczas symulacji klastra cholesterolu złożonego z 30 molekuł oraz układów z tą samą ilością cholesteroli, ale otaczającą CNT lub SiCNT. Cholesterol otaczający nanorurki rozkłada się równomiernie tworząc na ich powierzchni cienką warstwę. Dodatkowo molekuly preferują ułożenie hydrofilowymi grupami OH w kierunku "do siebie" przy równoczesnej orientacji wzdłuż głównej osi nanorurki.

Analiza dynamiki translacyjnej molekuł cholesterolu, na podstawie wykresu $\langle |\Delta\vec{r}(t)|^2 \rangle$ środków mas cholesteroli ([46], rys. 2) oraz wartości współczynników dyfuzji pozwala wnioskować, iż największą mobilnością translacyjną cechują się molekuly w klastrze. Obecność nanorurki wprowadza pewne uprządkowanie a zarazem zmniejsza mobilność cholesteroli, dzięki ich fizysorpcji na jej powierzchni. Skutkiem tego wartości współczynników dyfuzji dla molekuł w klastrze w porównaniu do tych na powierzchni CNT (lub SiCNT) są o rząd wielkości większe. Nie ma tu znaczenia rodzaj nanorurki - zarówno w układzie z nanorurką

homogeniczną, jak i heterogeniczną, molekuły cholesterolu tworzące cienkie warstwy na ich powierzchni cechują się podobną dynamiką. Warty odnotowania jest również fakt, że w temperaturze fizjologicznej wszystkie układy są stabilne, tzn. nie zachodzi proces desorpcji cholesterolu z klastra czy powierzchni nanorurki.

Druga część symulacji omawianych w [46] polegała na umieszczeniu klastra cholesterolu na powierzchni białka śródbłonka (1LQV). Następnie, po ustaleniu się równowagi w układzie, w klastro cholesterolu wbito różnie zorientowaną nanorurkę ([46], rys. 4). Po czasie 25 ns, przy wykorzystaniu techniki SMD, została ona odciągnięta od białka.

Najważniejszą konkluzją płynącą z przeprowadzonych symulacji jest fakt, że obie nanorurki (CNT, SiCNT) są w stanie zmniejszyć depozyt cholesterolu znajdujący się na białku poprzez adsorpcję fizyczną jego molekuł. Przy czym należy zwrócić uwagę na wyraźną korelację pomiędzy orientacją nanorurki względem klastra a ilością usuniętych molekuł. Nanostruktury osiągają najmniejszą skuteczność w przypadku, kiedy są umieszczane w klastrze cholesterolu jednym z końców (maksymalnie 30 %), a największą w przypadku, gdy ich orientacja jest zbliżona do orientacji depozytu (nawet ponad 80 %). Nanorurki węglowe cechuje mniejsza skuteczność w porównaniu do ich heterogenicznych odpowiedników, szczególnie w przypadku orientacji numer jeden ([46], rys. 4a), Może to być związane z większą długością wiązania Si - C, co powoduje, że SiCNT mają większą dostępną powierzchnię. Oddziaływania SiCNT - cholesterol są także silniejsze.

W kolejnych publikacjach zatytułowanych "Properties of ultrathin cholesterol and phospholipid layers surrounding silicon-carbide nanotube: MD simulations" [47], "Molecular Dynamics Simulations of the Dynamics of Small Cholesterol Systems" [48] oraz "Properties of Ultrathin Lipid Layers Surrounding Boron Nitride Nanotube: Computer Simulation Study" [49] opisane zostały poszerzone wyniki badań cienkich warstw otaczających nanorurki oraz samych klastrów cholesterolu. Wzięto także pod uwagę inną, zbudowaną z azotku boru, nanorurkę heterogeniczną.

Chronologicznie pierwszą była [47]. W odróżnieniu od [46], w badaniach poprzedzających przygotowanie publikacji uwzględniono także fosfolipidy. Symulacje przeprowadzono zarówno w obecności wody, jak i w układach bezwodnych. Poszerzono także zakres badanych temperatur, tzn. oprócz fizjologicznej uwzględnione zostały także niższe ($T = 260$ oraz 285 K), oraz wyższe ($T = 335$ oraz 360 K). Wreszcie, uwzględniono (dla cholesterolu) różne ilości molekuł tworzących cienką warstwę.

Pierwsza konkluzja, widoczna nawet w wizualizacji trajektorii symulacji, wskazywała na różnice między układami bezwodnymi jak i uwodnionymi. Niezależnie od typu nanorurki, w systemach bezwodnych lipidy orientowały się hydrofilowymi częściami do siebie. Z kolei w układach z wodą orientowały się one ku sobie niepolarnymi ogonami, przy czym ten proces jest bardziej widoczny w przypadku lżejszych cholesteroli ([47], rys. 1 i 2). Podobnie jak w [46], lipidy preferowały ułożenie wzdłuż głównej osi nanorurki.

W układach uwodnionych można dodatkowo zaobserwować, że polarne głowy fosfolipidów preferują środowisko wodne i desorbują z powierzchni hydrofobowych CNT/SiCNT, podczas gdy ogony POPC pozostają ściśle związane z nanorurką [47], rys. 2.

Analiza dynamiki translacyjnej (rys. 3, tabele 3 i 4) pozwoliła na wyciągnięcie kilku wniosków. Po pierwsze, mobilność lipidów rośnie wraz ze wzrostem temperatury. Dodatkowo lipidy łatwiej przesuwają się po gładkiej CNT, skutkiem czego ich dynamika w układach z tą nanorurką jest kilkukrotnie większa w porównaniu z układami z nanorurką węglowo - krzemową. Jest to szczególnie widoczne w układach bezwodnych - w systemach z wodą omawiane różnice są mniejsze. W pojedynczych przypadkach, np. przedstawionym na rys. 3e, jest nawet porównywalna. Obecność wody zwykle zmniejsza dynamikę translacyjną, chociaż w przypadku gęsto upakowanej warstwy (np. układy z 50 cholesterolami lub 25 fosfolipidami otaczającymi SiCNT) wpływ wody jest odwrotny. Wyjaśnienie tego zachowania jest takie, że im więcej molekuł w warstwie, tym mniejsza dostępna powierzchnia swobodna nanorurki na molekułę, co prowadzi do zmniejszenia dynamiki translacyjnej. Jednak w uwodnionych układach ($n = 50$ cholesteroli z SiCNT oraz $n = 25$ POPC z SiCNT) dynamika translacyjna lipidów jest większa w porównaniu z przypadkami bezwodnymi dlatego, że w tych systemach warstwa lipidów otaczających SiCNT jest na tyle szczelna, że nie pozwala na bezpośrednie sąsiedztwo nanorurka - woda. Tym samym molekuly wody nie otaczają lipidów także z boku, dodatkowo zmniejszając ich mobilność wzdłuż tych kierunków a same lipidy mogą się z większą swobodą przesuwać względem siebie. Dodatkowo, co też ma wpływ na dynamikę translacyjną, w układach z fosfolipidami, ich hydrofilowe głowy mogą desorbować z powierzchni silnie hydrofobowego SiCNT do otaczającego je środowiska wodnego.

Ostatnia kolumna tabeli 3 [47], prezentuje oszacowane wartości energii aktywacji dla systemów z cholesterolami. Energia aktywacji dyfuzji translacyjnej jest większa w przypadku układów z nanorurką węglowo - krzemową. Przyczyną tego są silniejsze oddziaływania

van der Waalsa pomiędzy cholesterolami i SiCNT. Obecność wody nie zmienia głównego mechanizmu dyfuzji, czyli ślizgania się molekuł cholesterolu po powierzchni nanorurek. Można zauważyć, że zarówno wartości energii aktywacji, jak i współczynników dyfuzji, zależą od ilości molekuł otaczających nanorurkę. Jest to skutek istnienia w układach dwóch procesów: fizysorpcji cholesterolu na powierzchni nanorurek oraz oddziaływań między molekułami cholesterolu. W układach, w których liczba cholesteroli jest niewielka dominuje proces związany z adsorpcją fizyczną. Energia aktywacji jest wysoka, gdyż duża ilość energii jest potrzebna do przeniesienia cholesterolu do innego centrum adsorpcji. Z drugiej strony występuje wiele niezajętych miejsc adsorpcji, więc liczba skoków pomiędzy centrami adsorpcji jest duża. Skutkuje to wysokim współczynnikiem dyfuzji.

Inną sytuację można zaobserwować z układach z SiCNT i fosfolipidami, gdzie obecność wody nie tylko obniża wartość energii aktywacji, lecz zwiększa wartość współczynników dyfuzji (tabela 4). Takie zachowanie jest skutkiem desorpcji polarnych głów POPC do środowiska wodnego (rys. 2).

Na rysunku nr 4 w publikacji [47] pokazane są wykresy radialnej funkcji rozkładu badanych lipidów z uwzględnieniem głównej osi nanorurki. Widoczna jest różnica w średnicy obu nanorurek (rys. 4a oraz d) wynikająca z różnych długości wiązań C - C oraz C - Si. Powierzchnia SiCNT jest, w kontekście oddziaływań van der Waalsa, bardziej złożona niż powierzchnia CNT, stąd też na panelach a oraz d widoczne są dodatkowe piki lub rozszczepienia pików w przypadku nanorurki heterogenicznej. Z panelu b można wywnioskować, że w obecności wody w znacznej części hydrofobowe molekuły cholesterolu preferują nieco bliższe ułożenie względem także hydrofobowej nanorurki.

Duże różnice widoczne są na wykresie 4c. Obserwacja wynikająca z tego rysunku dotyczy ułożenia grup CH_3 połączonych ze szkieletem sterolowym. W przypadku mniejszego układu ($n = 15$) grupy te są zwykle zorientowane w kierunku nanorurki, zwiększając tym samym średni dystans pomiędzy nimi. W większych systemach przeważa odwrotne ułożenie tych grup, co prowadzi do zmniejszenia odległości dzielącej nanorurkę i cholesterol. Opisana obserwacja została zwizualizowana na rys. 5.

Na rys. 4d, porównującym rozkład molekuł POPC na powierzchni CNT oraz SiCNT widoczne jest jeszcze większe, niż w przypadku cholesterolu, rozmycie maksimum. Szczególnie drugi pik przejawia większą złożoność. Dodatkowym istotnym czynnikiem, nie występującym w przypadku układów z cholesterollem, jest już wspomniana desorpcja głów fosfo-

lipidowych z powierzchni nanorurek. Inną różnicą jest, w przypadku z SiCNT, brak tak wyraźnych maksimów, jak w przypadku układów z CNT. Świadczy to o słabszej adsorpcji lipidów niż ma to miejsce w przypadku cholesterolu, zwłaszcza w przypadku nanorurki węglowo - krzemowej.

Rys. 6 ([47]) pokazuje wykresy $g(r)$ (radialnej funkcji rozkładu). Wykresy te potwierdzają wnioski powstałe podczas analizy krzywych $g_A(r)$ (rys. 4), dotyczących wpływu bardziej złożonej powierzchni SiCNT na ich kształt.

Publikacja [49] dokumentuje podobne układy, jak w przypadku [47], jednak dla przypadku nanorurki zbudowanej z azotku boru (BNNT). Również w tym przypadku molekuly cholesteroli/fosfolipidów tworzą na powierzchni nanorurki otaczającą ją cienką warstwę. Także orientacja molekul względem siebie zależy od tego, czy układ jest bezwodny, czy uwodniony (rys. 26.2). Mobilność molekul wzrasta wraz z temperaturą (rys. 26.3 i 26.4, gdzie przedstawione zostały, odpowiednio, odchylenia średniokwadratowe oraz współczynniki dyfuzji), przy czym mobilność cholesteroli w układzie bezwodnym z $n = 30$ molekul jest mniejsza w porównaniu do układu z $n = 15$, co jest związane z mniejszą dostępną powierzchnią swobodną BNNT w większym układzie (rys. 26.4 a, b). Odwrotna sytuacja ma miejsce w układzie z wodą gdzie większy układ cechuje minimalnie większa dynamika. Przyczyną takiego zachowania może być fakt, że w mniejszym układzie woda częściowo pokrywa także powierzchnię nanorurki zmniejszając tym samym mobilność hydrofobowych cholesteroli. Dodatkowym czynnikiem zwiększającym mobilność cholesteroli może być także niska hydrofobowość BNNT.

Dosyć wyraźne różnice, nie obserwowane nigdzie indziej w przypadku układów z BNNT, występują pomiędzy uwodnionym a bezwodnym układem z 30 cholesterolami (rys. 26.4 c). Obecność wody zmniejsza znacząco mobilność cholesterolu w opisywanym układzie. Jest to związane z faktem, że starając się ekranować powierzchnie hydrofobowe, molekuly lipidu orientują się węglowodorowymi ogonami ku sobie, zmniejszając w ten sposób powierzchnię ewentualnego kontaktu z wodą.

W przypadku układów z POPC, mobilność fosfolipidów jest podobna do mobilności cholesteroli w większym układzie i nie zależy od obecności wody w układzie (rys. 26.4 d).

Wykresy $g_A(r)$ (rys. 26.6) dla układów z cholesterolami, potwierdzają obserwację formowania się pojedynczej, ciągłej warstwy na powierzchni BNNT. Dla układów w fosfolipidami wykresy $g_A(r)$ są bardziej złożone, co ma związek z obecnością w strukturze POPC dłu-

gich ogonów oraz ruchliwej głowy.

Ostatni rysunek w [49], 26.8, jest porównawczy, z którego jednoznacznie wynika, że molekuly POPC otaczające BNNT cechuje, w porównaniu z CNT oraz SiCNT, największa dynamika translacyjna. Spośród badanych nanorurek to właśnie BNNT jest najbardziej hydrofilowa i w tym należy upatrywać przyczyny tak dużej mobilności molekuł na powierzchni tej nanorurki.

Pozycja [48] opisuje zachowanie układów zbudowanych z samych cholesteroli, bez nanorurek. Wyniki dla tych układów są do pewnego stopnia zbieżne z tymi, w których obecna jest nanorurka, tzn. w zależności od obecności wody molekuly układają się grupami OH w kierunku do siebie lub na zewnątrz. Podobnie jak w układach z nanorurkami, w badanym zakresie temperatur nie zaobserwowano przejść fazowych. Również wartości współczynników dyfuzji rosną wraz ze wzrostem temperatury układów. Jednak obliczone wartości D są niższe niż w poprzednich układach z nanorurkami co świadczy o ciasnym ułożeniu się molekuł względem siebie. Wartości współczynników dyfuzji są niższe w przypadku układów z wodą, warto jednak odnotować, że podobnie jak w przypadku z BNNT [49], w układach bezwodnych większą dynamiką translacyjną cechuje się układ mniejszy, a w uwodnionych większy. W mniejszych układach molekuł jest na tyle mało, że nie można mówić o powstaniu rdzenia cholesterolowego, więc woda sąsiaduje z praktycznie każdą molekułą cholesterolu ograniczając w ten sposób jej mobilność. W przypadkach, kiedy cholesteroli jest więcej, woda nie dociera do molekuł w rdzeniu utworzonego klastra i nie zmniejsza ich dynamiki tworząc wokół polarną otoczkę.

W przedstawionych powyżej publikacjach dyskutowane były otrzymane wyniki badań dotyczących interakcji lipidów z nanostrukturami, które zostały wykorzystane jako indentery penetrujące dwuwarstwę fosfolipidową. Otrzymane wyniki indentacji błony zostały omówione w serii publikacji zaprezentowanych w dalszej części tej sekcji.

Pierwszą publikacją dotyczącą zagadnienia indentacji dwuwarstwy fosfolipidowej przy pomocy, w tym przypadku nanorurki węglowej, był artykuł zatytułowany "Nanoindentation of biomembrane by carbon nanotubes – MD simulation" [37].

W tej pracy omawiane są wyniki penetracji zarówno przy użyciu nanorurki otwartej, jak i zamkniętej, obu o chiralności (10, 10). Należy także zauważyć, że zostały zbadane zarówno

proces wbijania, jak i wyciągania nanorurki z dwuwarstwy. Rysunki, które wizualizują wspomniane procesy to rys. 2 dla wbijania i rys. 9 dla wycofywania.

Pierwszą analizowaną wielkością jest średnia siła potrzebna do przebiccia błony (rys. 3 i 4). Jest ona rzędu nanoniutonów dla każdej badanej prędkości (2, 12 i 20 m/s). Zależy ona od prędkości indentera i przyjmuje najwyższe wartości dla największej prędkości. Maksymalna wartość siły pojawia się w momencie rozpychania przez nanorurkę szkieletu glicerolowego, który jest najbardziej sztywną częścią fosfolipidu. Następnie siła zaczyna maleć. Ważną konkluzją jest podobieństwo wyników otrzymanych dla nanorurki zamkniętej w porównaniu z nanorurką otwartą. Nanorurka zamknięta wydaje się być nieco mniej inwazyjna dzięki połowie fullerenu, którym jest domknięta i co da się zauważyć na rys. 8. Na zrzutach ekranu widać, że nanorurka zamknięta rozpycha lipidy błonowe podczas gdy nanorurka otwarta często pcha je przed sobą - na rys. 8b widać wyrwane z błony lipidy. Jednak pomimo wskazanej różnicy, na wykresach siły (rys. 4), pracy (rys. 5) i potencjału średniej siły (PMF) (rys. 7) widać duże podobieństwo zarówno w kształcie wykresu, jak i przyjmowanych wartościach. Jest to o tyle istotny wniosek, że w kolejnych symulacjach możliwe było użycie nanorurki otwartej, która jest łatwiejsza do zamodelowania.

Po ponownym zrównoważeniu układu z białą nanorurką rozpoczęto proces jej wycofywania z dwuwarstwy poprzez zmianę zwrotu wektora prędkości na przeciwny (w porównaniu do procesu przebijania). Rys. 9 wizualizuje ten proces pozwalając wnioskować, że dwuwarstwa fosfolipidowa bardzo szybko wraca do swojej konfiguracji początkowej poprzez bieżące eliminowanie zmian wywołanych procesami indentacji.

W publikacji [50] również użyto CNT do indentacji błony, jednak tym razem najmniejsza prędkość indentacji była znacznie niższa od omawianych w [37] i wynosiła 0.5 m/s, czyli czterokrotnie mniej niż najwolniejsza badana poprzednio. Do przebiccia błony użyta została jednostronnie domknięta nanorurka węglowa, odwrócona o 180° w porównaniu do [37] i wypełniona tlenkiem azotu. Taka orientacja CNT miała, podczas jej przesuwania, przeciwdziałać ucieczce tlenku azotu z jej wnętrza. Wypełnienie CNT molekułami NO miało na celu sprawdzenie, czy gaz potrafi opuścić nanorurkę po jej zatrzymaniu: a) pomiędzy fosfolipidami błonowymi, b) po przebicciu dwuwarstwy fosfolipidowej. Zrzuty ekranów konfiguracji początkowej oraz konfiguracje chwilowe w kolejnych stadiach procesu indentacji są pokazane na rys. 1 i 2 [50].

Obliczone wartości średniej siły oraz pracy (rys. 3 i 4) są ponad dwukrotnie niższe od tych

prezentowanych w [37], dla najniższej prędkości. Również wartości potencjału średniej siły są zdecydowanie niższe (rys. 5). Oznacza to, że podczas procesu przebijania, mniejsza prędkość w mniejszym stopniu ingeruje w organizację lipidów w dwuwarstwie.

Powyższy wniosek nie jest jednak równoznaczny z brakiem wpływu indentera na błonę. Nawet przy tak niewielkiej prędkości, jak badana, na rys. 2d zauważyć można, że jeden z lipidów błonowych został wyrwany z dwuwarstwy.

Zachowanie tlenu azotu po zatrzymaniu nanorurki obrazują rys. 6 i 7. Molekuły NO opuszczają wnętrze nanorurki zarówno w przypadku, kiedy zatrzymała się ona pomiędzy lipidami, jak i wtedy, kiedy przebiła całą dwuwarstwę, a jej otwarty koniec znajduje się w wodzie po drugiej stronie błony. Proces dyfuzji NO pomiędzy lipidy jest bardziej efektywny ($\approx 22\%$ uwolnionych molekuł gazu w czasie 7 ns) w porównaniu do tego do wody ($\approx 17\%$ uwolnionych molekuł gazu). Przyczyną tego jest fakt, że małe cząsteczki wody są w stanie znacznie bardziej efektywnie czopować otwarty koniec nanorurki w porównaniu z długimi i trudno reorganizującymi się łańcuchami fosfolipidów. Czynnikiem ułatwiającym przenikanie NO do wody jest słaba, trwała polaryzacja cząsteczek gazu. Molekuły NO, jako wolne rodniki, posiadają w przyjętym w symulacjach modelu trwałe moment dipolowy.

Wykres przemieszczenia średniokwadratowego (rys. 7) pokazuje, że cząsteczki NO uwolnione w błonie pozostają pomiędzy fosfolipidami, natomiast te uwolnione do wody poruszają się w obrębie całej komórki symulacyjnej. Powyższa obserwacja jest przyczyną tak dużych dysproporcji w wykresach MSD, jak te widoczne na rys. 7.

Kolejne dwie publikacje, [51] i [38], opisują wpływ średnicy CNT na strukturę błony podczas procesów indentacji i wysuwania nanorurki. W obu pracach użyto nanorurek o różnych średnicach.

Pozycja [51] opisuje wstępne wyniki symulacji komputerowych. Zasadnicza różnica polega na użyciu tylko pojedynczej warstwy zbudowanej z fosfolipidów i białek. Warstwa ta podparta była "od spodu" unieruchomionym grafenem. Te badania przeprowadzono bez udziału wody.

Rys. 2 oraz rys. 4 potwierdzają wcześniejsze konkluzje ([37, 50]) dotyczące zależności pomiędzy prędkością indentacji a wymaganą siłą/pracą. Na rys. 2 widać również, że siła rośnie stopniowo aż do osiągnięcia przez CNT szkieletu glicerolowego. Po przebiciu się nanorurki przez najbardziej sztywną część fosfolipidów zaczyna ona maleć.

Nie zaobserwowano natomiast znaczących różnic w potrzebnej do penetracji siły w przypadku użycia CNT o różnych średnicach (rys. 3). Brak rozbieżności w profilach siły wynika z faktu, że pojedyncze lipidy co prawda są wrywane z warstwy, jednak ich ilość jest w każdym przypadku zbliżona. Dzieje się tak dlatego, że lipidy w warstwie są ułożone głowami w kierunku zbliżającej się nanorurki, co znacząco ułatwia ich rozpychanie. Dodatkowo, w przypadku CNT o większych średnicach, jest to najlepsze ułożenie, jeżeli chodzi o możliwość znalezienia się fosfolipidu wewnątrz przesuwanej się nanorurki. W takiej sytuacji nie jest on popychany przed nanorurką i jego wkład w wielkość siły jest minimalny.

Inne wnioski dotyczą indentacji pełnej dwuwarstwy fosfolipidowej [38]. Rys. 2 i 3a wskazują wyraźną zależność między średnicą CNT a siłą. Indentacja błony przy użyciu nanorurki o większej średnicy wymaga większej siły, co znajduje odzwierciedlenie na rys. 2. Jedynie w nielicznych przypadkach, jak pokazany na rys. 3a (najmniejsza prędkość) maksymalne wartości siły są podobne. Podobny związek między potrzebną siłą, prędkością indentera i jego średnicą istnieje również w przypadku wycofywania CNT z dwuwarstwy, przy czym dla tego procesu średnie wartości siły są niższe.

Zależność między średnicą nanorurki a siłą podczas procesu indentacji jest konsekwencją przebijania nanorurką bardziej złożonej struktury dwuwarstwy, gdzie fosfolipidy są również ułożone resztami kwasu tłuszczowego w kierunku CNT. Nie są tutaj rzadkimi sytuacje, w których, po zakończonej indentacji można zaobserwować, że jeden z ogonów fosfolipidu znajduje się wewnątrz, a drugi na zewnątrz nanorurki (rys. 5). Dodatkowo, jeżeli lipid zostanie wyrwany z górnej warstwy błony, jest on przepychany także przez dolną, bardzo często powodując wrywanie lipidów również z tejże warstwy.

Tabela 1b obrazuje średnią ilość lipidów wyrwanych z błony podczas procesu indentacji. Widoczna jest zależność pomiędzy ich ilością a prędkością oraz średnicą indentera. Większa prędkość oznacza większą ilość wyrwanych lipidów. Podobna zależność dotyczy średnicy nanorurki - większa średnica oznacza więcej wyrwanych fosfolipidów i cholesterolu. W tabeli 1b uwzględniono także te molekuly, które znalazły się wewnątrz CNT, a których ilości podaje tabela 1a. Jedynie w przypadku nanorurki o najmniejszej średnicy lipidy okazują się zbyt duże, żeby zmieścić się w jej wnętrzu. Nie zmienia to faktu, że możliwe są sytuacje takie jak ta pokazana na rys. 5, gdzie właśnie w przypadku nanorurki (7, 7) jeden ogon znalazł się wewnątrz, a drugi na zewnątrz indentera.

Część c tabeli 1 pokazuje ilości molekuł, które zostały wyrwane z dwuwarstwy podczas

obydwoh procesow: wbijania a nastepnie wycofywania. Widać, że ilość oderwanych od błony lipidow zmalała w porównaniu do samego procesu indentacji. Oznacza to, że część lipidow wyrwanych podczas procesu przebijania, w trakcie wycofywania CNT z dwuwarstwy zostaje z powrotem wbudowanych w jej strukturę. Mamy tu jednak sytuację odrotną do indentacji - mniejsza prędkość ekstrakcji oznacza większą ilość wyrwanych lipidow błonowych. Prowadzi to do konkluzji, że aby zminimalizować ilość molekuł wyrwanych z błony należy ją przebijać z możliwie najniższą prędkością, natomiast indenter powinien być z niej usuwany z dużą prędkością.

Powyższy wniosek potwierdza także rys. 8, gdzie pokazano wykresy położenia wybranego atomu węgla (C2) szkieletu glicerolowego fosfolipidow w funkcji odległości od nanorurki. Membrana zarówno podczas procesu indentacji, jak i wycofywana jest zniekształcona przez przesuwającą się nanorurkę, a skala tego zniekształcenia zależy od prędkości CNT. Dwuwarstwa fosfolipidowa podczas procesu indentacji doświadcza ugięcia (rys. 1d i e), a podczas procesu wysuwania podąża za indenterem będąc podciągana do góry (rys. 9b).

Każda z nanorurek użytych podczas badań powodowała opisaną powyżej deformację błony, przy czym skala deformacji jest najmniejsza w przypadku CNT o najmniejszej średnicy. Stopień deformacji zależy także od prędkości penetracji błony - w przypadku indentacji przeprowadzonej z niewielką prędkością ugięcie błony jest mniejsze (rys. 8c versus rys. 8d), gdyż błona ma większą możliwość niwelowania zmian spowodowanych przesuwającym się CNT. Z kolei podczas wycofywania nanorurki (rys. 8a i b) prędkość powinna być duża ponieważ uniemożliwia to lipidom związanie się z atomami węgla z otwartego końca nanorurki i w efekcie podciągnięcie całego fragmentu błony do góry. Opiszana konkluzja jest zgodna z tą wyciągniętą podczas dyskusowania ilości wyrwanych molekuł.

W publikacji [38] więcej uwagi poświęcono procesowi zablizniania się dwuwarstwy po indentacji oraz skali jej uszkodzenia. Zauważyć należy, że największa średnia ilość lipidow wyrwanych z błony podczas przeprowadzonych eksperymentow wynosi 4, co stanowi zaledwie 1.4% lipidow użytych w modelu błony. Również proces zablizniania jest szybki, o czym świadczy rys. 9. Pokazano na nim, że cała woda znajdujaca się wewnątrz nanorurki, a która teoretycznie mogłaby zostać w dwuwarstwie, została z niej usunięta już w trakcie wycofywania CNT. Dzięki temu błona, nawet pomimo widocznej na rys. 9b deformacji spełnia już swoją funkcję ochronną dla komórki. Również po całkowitej separacji dwuwarstwy - nanorurka, błona jest w stanie szybko ($\approx 12ns$) wrócić do konfiguracji początkowej

niwelując wybrzuszenie widoczne na rys. 9b.

Eksperymenty komputerowe nanoindentacji zostały również przeprowadzone dla heterogenicznej nanorurki węglowo - krzemowej. Dyskusja uzyskanych wyników oraz ich porównanie z wynikami dla nanorurki węglowej [38] znajduje się w publikacji [26].

Badania zostały przeprowadzone dla takich samych prędkości, jak w przypadku nanorurki homogenicznej. Wykresy siły potrzebnej do przebicia dwuwarstwy zamieszczone są na rys. 2a i mają one podobny charakter, jak w przypadku nanorurki węglowej. Jednak maksymalne wartości siły, porównując je z rys. 2b z [38] (dla nanorurki węglowej o tej samej chiralności), są wyższe. Wiązanie Si-C jest dłuższe w porównaniu do C-C stąd SiCNT ma większą średnicę i jest to jeden z powodów, dla których do przebicia dwuwarstwy jest potrzebna większa siła. Inną przyczyną może być fakt, że nanorurka węglowa nie jest tak gładka, jak CNT, w kontekście oddziaływań van der Waalsa. W konsekwencji jej ruch pomiędzy lipidami może być bardziej złożony.

Dłuższe wiązanie Si-C oznacza też większą elastyczność badanej nanorurki w porównaniu z CNT, szczególnie w procesie indentacji, gdy oddziaływania dwuwarstwa - nanorurka są większe. Przyglądając się zrzutom ekranu, w szczególności b i c, pokazanym na rys. 1 można nawet wizualnie zauważyć, że rzeczywiście SiCNT jest bardziej elastyczna niż CNT (porównać można z rys. 2b i c, [50]).

Podobnie, jak w przypadku z nanorurką węglową, również tutaj dwuwarstwa pod naciskiem nanorurki węglowo - krzemowej zostaje ugięta. Skala ugięcia zależy od prędkości wbijania (im jest ona mniejsza tym delikatniejsze ugięcie) i może być powiązana z maksimum siły (rys. 2a), która występuje przy rozpychaniu szkieletów glicerolowych fosfolipidów. Delikatniej naciskana dwuwarstwa jest w stanie ugiąć się nieco bardziej niż gwałtownie uderzona przez obiekt poruszający się pięciokrotnie szybciej. Z tego też powodu maksimum siły przesuwają się w stronę większych głębokości indentacji wraz ze zmniejszaniem się prędkości przebijania. Podobnie przy wyciąganiu (rys. 2b), wolno wyciągana nanorurka dłużej utrzymuje kontakt w dwuwarstwą, gdyż jej fragment sąsiadujący z SiCNT jest podnoszony w górę. Opisane zachowanie ten nie zawsze występuje dla nanorurki węglowej (np. dla CNT (12, 12), procesu indentacji - rys. 2c, [38]), aczkolwiek w przypadku CNT o takiej samej chiralności (10, 10), jest również obserwowany.

Jednak, po zakończeniu procesu indentacji, całkowite ugięcie jest najmniejsze dla najmniejszej prędkości. Dzieje się tak dlatego, że pomimo opisywanego w poprzednim akapicie

dużego początkowego ugięcia (kiedy nanorurka osiąga szkielety glicerolowe fosfolipidów), dwuwarstwa może zredukować powstałą deformację dzięki długiemu czasowi całego procesu przebijania z niewielką predkością.

W przypadku omawianej publikacji [26] ugięcie dwuwarstwy zostało rozseparowane na górną (zrzut ekranu 1a - warstwa bliższa nanorurce) i dolną warstwę. O ugięciu warstw należy mówić w kontekście położenia atomu fosforu DMPC w funkcji odległości od osi nanorurki (rys. 3). Dzięki temu można zauważyć, że atomy fosforu, szczególnie te znajdujące się w bezpośrednim sąsiedztwie SiCNT i umiejscowione w dolnej warstwie doświadczają większych dyslokacji niż te z górnej. Wiązać się to może z wrywaniem fosfolipidów z błony w procesie indentacji, gdyż temu procesowi, po pierwsze, podlegają fosfolipidy sąsiadujące z nanorurką, a po drugie, co wykazano wcześniej, większa jest możliwość wyrwania fosfolipidu z dolnej warstwy. Z kolei kiedy nanorurka jest wycofywana z błony, powtórnie te same fosfolipidy doświadczają dużego przemieszczenia, gdyż mogą się znaleźć z powrotem pomiędzy fosfolipidami błonowymi i zostać wbudowane w strukturę dwuwarstwy.

Na rys. 6 porównano ilości wyrwanych przez SiCNT lipidów z przypadkiem CNT o tej samej chiralności oraz CNT (15, 15). W całym procesie penetracji dwuwarstwy jedynie dla najmniejszej prędkości SiCNT wyrwała podobną liczbę lipidów, jak CNT (15, 15). Dla pozostałych dwóch prędkości ilość ta była większa, niż w przypadku nanorurki węglowej. Nie dyskwalifikuje to jednak SiCNT jako kontenera na substancje dostarczane do wnętrza komórki gdyż pamiętać należy, że to jest wciąż poniżej 1.5% lipidów, które zostały użyte w przygotowanym modelu błony.

Publikowane dotychczas wyniki badań były dla przypadku idealnego, kiedy nanoindenter przesuwiał się prostopadle w kierunku błony i był zorientowany dokładnie wzdłuż osi z. W rzeczywistości będzie trudno o taką idealizację, dlatego przeprowadzono kilka serii symulacji przypadków nieidealnych dla trzech kątów (4.5° , 9° i 15°), a wyniki zostały opublikowane w [39]. W symulacjach użyte zostały nanorurki o chiralności (10, 10), CNT oraz SiCNT. Dodatkowo, symulacje zostały przeprowadzone dla dwóch sposobów przebijania dwuwarstwy: wzdłuż głównej osi nanorurki oraz wzdłuż osi z, prostopadle do dwuwarstwy (rys. 1a). Symulacje przeprowadzono dla dwóch prędkości, 0.5 m/s oraz 2 m/s.

Na rys. 2 pokazane zostały wykresy średniej siły. W każdym przypadku przebicie przy użyciu SiCNT wymaga największej siły. Dla przypadku indentacji wzdłuż osi nanorurki wykresy siły są podobne dla najmniejszego i największego kąta, jednak różnią się one zna-

cząco w przypadku indentacji wzdłuż osi z, gdzie siła dla dużego kąta jest zdecydowanie większa. Różnica wynika z faktu, że w przypadku wykresów pokazanych na rys. 2 a i c występuje proces przebijania, natomiast dla pozostałych bardziej właściwym jest określenie cięcia. Należy zauważyć, że w przypadku przecinania nanorurka dodatkowo rozpycha lipidy swoją powierzchnią boczną i ten efekt zwiększa się wraz ze zwiększaniem się kąta odchylenia. Skutkiem tego nanorurka poruszająca się wzdłuż osi z pod kątem 15° musi podczas procesu indentacji rozsunąć więcej lipidów, niż ta ochylna o kąt 4.5° . Stąd też tak wyraźne różnice w profilach siły. Pozostałe konkluzje wynikające z rys. 2 są zgodne z tym omawianymi wcześniej.

Dyskutowane powyżej różnice wynikające z różnych sposobów przemieszczania nanorurki wpływają również na ilość wyrwanych lipidów (tabela 1). We wszystkich przypadkach, w których nanorurka poruszała się wzdłuż swej osi, ilość wyrwanych lipidów była mniejsza. Nanorurki tnące błonę wzdłuż osi z mają kontakt z większą ilością molekuł w błonie, co przekłada się na bardziej znaczącą liczbę wyrwanych cząsteczek. Podobnie można wytłumaczyć obserwację, że dla większych kątów liczba wyrwanych fosfolipidów/cholesteroli jest również większa. Jednak biorąc pod uwagę indentację pod kątem, większa prędkość przebijania skutkuje mniejszą ilością wyrwanych molekuł z dwuwarstwy. Uzyskane wyniki są inne niż te prezentowane w [38]. Przyczyny takiego zachowania są jednak trudne do zbadania w kontekście klasycznej dynamiki molekularnej.

Na rys. 4 [39] pokazane zostało ugięcie dwuwarstwy, oszacowane na podstawie przemieszczenia atomu C2 węgla szkieletu glicerolowego. Wyraźnie widoczne jest przesunięcie w lewo dla największego kąta w obu sposobach indentacji. Nieco większe jest dla przypadku ruchu wzdłuż osi nanorurki, gdyż jej koniec przebił dwuwarstwę trochę bardziej z lewej strony w porównaniu do ruchu tylko wzdłuż osi z. Wartości ugięcia dla przypadku cięcia są zwykle nieco niższe, gdyż w tym przypadku jest mniejsze prawdopodobieństwo pchania przed sobą lipidów. Dolna warstwa lipidów doświadcza mniejszego ugięcia, jednak jest to skutek nie całkowitej indentacji dwuwarstwy fosfolipidowej (pokazane wykresy odpowiadają położeniu nanorurki pokazanemu na rys. 1c).

Zdecydowanie mniej korzystnie wypada w SiCNT w porównaniu do CNT - dłuższa i o większej średnicy powoduje najczęściej spore negatywne zmiany w strukturze dwuwarstwy, szczególnie dolnej warstwie.

Wyniki przedstawione w tej pracy potwierdzają również wcześniejszą konkluzję wiążącą

mniejsze ugięcie dwuwarstwy z niższą prędkością indentacji (rys. 4 i 5).

Rys. 5 odzwierciedla zmiany w położeniach atomów C2 w kolejnych stadiach symulacji. Należy w tym miejscu odnotować fakt podobieństwa tych zmian dla głębokości indentacji $z = -55\text{\AA}$ i $z = -85\text{\AA}$, górnej warstwy. Dla głębokości $z = -55\text{\AA}$ przebijania, osiągnęła ona swoje maksymalne ugięcie i dalsza indentacja nie powoduje już znaczących zmian (rys. 5d). W przypadku procesu przecinania lipidy z górnej warstwy są w dalszym ciągu naciskane przez boczną powierzchnię nanorurki co skutkuje zmianą ich położenia w kierunku $-z$, chociaż maksymalne ugięcie się już nie zwiększa (rys. 5a i c). Natomiast dolna warstwa wciąż ma potencjał do dalszego uginania się zarówno jeżeli chodzi o największą wartość ugięcia, jak i nacisk wywołany boczną powierzchnią nanorurki.

Wykres profilu gęstości (rys. 3) dobrze ilustruje opisywany proces. W miarę zwiększania głębokości indentera zaburza się struktura dwuwarstwy fosfolipidowej. W konfiguracji początkowej granice dolnej i górnej warstwy są wyraźnie zaznaczone. W trakcie postępowania procesu indentacji widać przesunięcie masy całej dwuwarstwy. Prawe wydłużenia profili gęstości dla największych głębokości indentacji odpowiadają tym lipidom, które zostały wyrwane z błony.

W publikacji [39] znajduje się także sekcja poświęcona wycofywaniu nanorurek z błony, przy czym pod uwagę został wzięty tylko największy kąt, ponieważ powoduje największe zmiany w strukturze błony. Nieco większa siła jest wymagana podczas większej prędkości (rys. 7a), a także podczas przemieszczania nanorurki tylko wzdłuż osi z (rys. 7b). Jednak zarówno wielkość siły, jak i dysproporcje dla różnych prędkości czy sposobów wyciągania są mniejsze, niż w przypadku indentacji. Również zmiany w położeniach atomów C2 są mniejsze niż dla indentacji (rys. 7c, 7d i 8). Z analizy wymienionych rysunków wynika, że mniejsza prędkość wycofywania w większym stopniu deformuje błonę (rys. 7c, rys. 8a versus 8c), co jest zgodne z wcześniejszymi wnioskami. Potwierdzony jest także wniosek, iż nanorurka heterogeniczna w większym stopniu deformuje mebranę (rys. 7d). Wycofywanie SiCNT wzdłuż osi nanorurki z dużą prędkością powoduje większe odkształcenia błony niż wyciąganie wzdłuż osi z (rys. 7d). Również dużą deformację błony powoduje wyciąganie SiCNT wzdłuż osi z z małą prędkością (rys. 8d). Należy jednak jeszcze raz przypomnieć, że skala deformacji dwuwarstwy fosfolipidowej w procesie wycofywania jest nawet czterokrotnie mniejsza, niż w przypadku indentacji. Liczba lipidów wyrwanych z dwuwarstwy (tabela 2) potwierdza wcześniejszy wniosek, że podczas wycofywania nanorurki część lipi-

dów wyrwanych podczas procesu indentacji wbudowuje się z powrotem w strukturę błony. Publikacja [39] jest najnowszą dotyczącą indentacji przy użyciu nanorurek. Jednak oprócz nich, przeprowadzono serię symulacji indentacji przy użyciu warstwy grafenowej, a uzyskane wyniki są opisane w publikacji [34].

Zamodelowane zostały warstwy grafenowe różniące się między sobą wysokością oraz szerokością. Listę wszystkich użytych grafenów podaje tabela 1 [34], przy czym zauważyć należy, że największa szerokość grafenu jest porównywalna do wielkości komórki symulacyjnej wzdłuż osi y .

W porównaniu do symulacji z nanorurkami zmienił się również sposób doboru atomów SMD, gdyż w sytuacji pokazanej na rys. 1d, kiedy atomami SMD były te z górnej warstwy, grafen bardzo często obracał się o 180° . Skutkiem tego były sytuacje, jak ta pokazana na rys. 2. Z tego też powodu w eksperymentach komputerowych ciągnięto grafen za atomy wyróżnione na rys. 1b i c. Symulacje przeprowadzono dla dwóch prędkości indentera, 1 m/s i 2 m/s.

Tradycyjnie już dyskusję wyników w publikacji [34] rozpoczęto od analizy wykresów siły, której wartości są podobne do tych uzyskanych dla nanorurek. Również i w tym przypadku przebijanie z większą prędkością wymaga większej siły (rys. 3a). Nie ma natomiast tutaj znaczenia, czy atomy SMD znajdują się z boku, czy u dołu warstwy grafenowej. Z rys. 3c wynika, że im wyższy jest grafen, tym mniejsza potrzebna siła do przebicia. Wysokie arkusze powodują, że występuje poślizg między dwuwarstwą, a grafenem. Najsilniej oddziałują z dwuwarstwą atomy znajdujące się na brzegach grafenu. W przypadku najniższego arkusza, wkład do siły pochodzi nie tylko od jego dolnych atomów rozpychających lipidy, ale również od górnych, które ciągną fosfolipidy/cholesterole. Na rys. 3c możemy zaobserwować, że im szerszy grafen, tym większa siła potrzebna do przebicia membrany. Oprócz tego można również zaobserwować przesunięcie maksimum siły, co jest wynikiem adhezji między lipidami a grafenem. Skutkiem tego dwuwarstwa fosfolipidowa ulega znaczącemu ugięciu.

W przypadku grafenu do wartości siły dochodzi jeszcze jedna składowa. O ile w przypadku wąskich arkuszy przebijanie jest dość mało inwazyjne i przypomina to z nanorurkami, o tyle w przypadku szerokich nie wszystkie lipidy, z uwagi na mocno zmniejszoną dostępną wolną objętość, potrafią uciec przed grafenem. Skutkiem tego spora ich ilość zaczepia się o dolną warstwę atomów grafenu i jest przezeń pchana.

Wykresy pracy (rys. 4 i 5) potwierdzają wcześniejsze wnioski. Jest ona zależna proporcjonalnie od prędkości indentera i jest mniejsza w przypadku przebijania wyższymi arkuszami. Zależy ona także od szerokości grafenu. Analizując położenia czarnych kwadratów na rys. 5, czyli sytuację, kiedy nawet najniższa warstwa grafenowa nie oddziaływała swoimi najwyższymi atomami z lipidami dwuwarstwy (mogłoby to wprowadzić błąd w opisywanym wniosku), widać, że większa szerokość grafenu jest związana z większą pracą potrzebną do przebicia dwuwarstwy fosfolipidowej.

Ugięcie dwuwarstwy fosfolipidowej (rys. 6) jest znacząco większe w porównaniu do układów z nanorurkami i potrafi osiągnąć ponad 30\AA . Wizualną skalę ugięcia ilustruje rys. 7. W niewielkim stopniu zależy ono od prędkości indentacji oraz sposobu ułożenia atomów SMD (rys. 6a i b), natomiast w największym stopniu zależy od wysokości warstwy grafenowej. Największa dyslokacja atomów C2 fosfolipidów wystąpiła w przypadku układów 96×32 i 96×12 i była ona spowodowana tymi samymi przyczynami, które wymieniono podczas omawiania wykresów siły.

W przypadku indentacji grafenem, w kontekście ilości wyrwanych lipidów błonowych, większa prędkość przebijania jest mniej inwazyjna (tabela 3). Szersze arkusze grafenu usuwają większą ilość lipidów z membrany. Nie ma natomiast jednoznacznej korelacji pomiędzy układami, w których atomy SMD są z boku warstwy grafenowej a tymi, w których są z dołu.

Analizując opisywane wyniki można odnieść wrażenie, że grafen jest bardziej destrukcyjny dla struktury dwuwarstwy fosfolipidowej, niż nanorurki. Jednak zauważyć należy, że w [34] duży nacisk jest położony na analizę przypadków skutkujących największym spustoszeniem w organizacji lipidów w błonie. Z tego też powodu na str. 6597 publikacji, prawej kolumna, zawarto wyjaśnienie, dlaczego najważniejsze jest porównanie nanorurki SiCNT z grafenem 56×52 . Zawarte tam uzasadnienie prowadzi do wniosku, że grafen nie jest aż tak inwazyjny. Co więcej, w przypadku niektórych prezentowanych wielkości okazuje się on być nawet mniej destrukcyjny niż wcześniej omawiane nanorurki.

W procesie wycofywania grafenu uwzględniono układy, które okazały się najbardziej destrukcyjne podczas indentacji oraz układ 56×52 , jako porównawczy dla nanorurek. Warstwy grafenowe stosunkowo wysoko podnoszą membranę (rys. 8d) co znajduje odzwierciedlenie w wykresie dyslokacji atomów C2 (rys. 10). Zaskakuje natomiast stosunkowo niewielka liczba wyrwanych z błony molekuł. Dla układu z grafenem 96×52 nie stwier-

dzono żadnego przypadku wyrwania zaś dla układu z arkuszem 96×32 ilość ta zmniejszyła się w przybliżeniu siedmiokrotnie w porównaniu do indentacji. Paradoksalnie może to być skutek tak znaczącego pociągnięcia przez warstwy grafenowe dwuwarstwy fosfolipidowej, gdyż oddziaływania van der Waalsa pomiędzy tak dużym fragmentem błony a lipidami które mogłyby być wyrwane były większe niż pomiędzy tymi lipidami a najniższymi atomami warstw grafenowych.

Symulacje układu z grafenem o rozmiarze 56×52 potwierdzają wnioski wyciągnięte podczas omawiania procesu indentacji. Podobny, a w niektórych aspektach nawet mniejszy, jest wpływ na dwuwarstwę tej struktury w porównaniu z układami z nanorurkami.

Publikacja [34] zawiera jeszcze jedną sekcję, poświęconą samoregeneracji dwuwarstwy fosfolipidowej po procesie indentacji. Do przeprowadzenia symulacji dotyczących tej sekcji inspiracją były znaczące uszkodzenia błony spowodowane sposobem indentacji pokazanym na rys. 1d i jego skutkami (rys. 2). Dokładniej te skutki zostały zwizualizowane na rys. 11, który dotyczy dwóch ekstremalnych przypadków (lewy i prawy panel). Uszkodzenia, które w rzeczywistości odpowiadałyby rozerwaniu błony i bezpośredniemu kontaktowi środowiska zewnętrznego z wnętrzem komórki są wyraźnie widoczne.

Jednak najbardziej istotnym jest fakt, że dwuwarstwa, nawet po tak znacznych uszkodzeniach, była w stanie się zregenerować, co w przypadku rzeczywistej komórki oznaczałoby separację wnętrza komórki od środowiska zewnętrznego (rys. 12). Proces ten odbył się, we wszystkich badanych przypadkach, w czasie krótszym niż 75 ns. Faktem jest, że na rys. 12, prawy panel, widać wciąż kontakt między górną i dolną warstwą wody, jednak pokazana seria rysunków została zrobiona po 50 ns. Należy dodatkowo zaznaczyć, że dwuwarstwa fosfolipidowa była w stanie się zregenerować nawet pomimo braku części lipidów (nawet 12.5%), które zostały wyrwane przez grafen w procesie indentacji.

Ostatnią nanostrukturą wziętą pod uwagę w serii badań poświęconych ich interakcjom z lipidami błonowymi jest nanostożek krzemowy. Wpływ nanostożka na dwuwarstwę będzie opisany w publikacji zatytułowanej "Influence of silicon nanocone on cell membrane self-sealing capabilities for targeted drug delivery - computer simulation study", która została wysłana do recenzji w czasopiśmie *Archives of Biochemistry and Biophysics*.

Kolejne etapy procesu indentacji są zwizualizowane na rys. 1. Z kolei na rys. 2 pokazano wykresy siły i pracy potrzebnej do przebicia dwuwarstwy fosfolipidowej. Siła i praca są tego samego rzędu wielkości, co w poprzednio omówionych publikacjach, jak również

badaniach eksperymentalnych przy wykorzystaniu mikroskopu sił atomowych, przeprowadzonych przez Jamesa Li i współpracowników [52]. Wykres siły (rys. 2a) ma nieco inny charakter niż poprzednio omawiane. Charakteryzuje się on silnym wzrostem w fazie rozpychania głów i szkieletów glicerolowych fosfolipidów z górnej warstwy. Następnie, w obszarze kolejnych 70Å siła wciąż wzrasta, chociaż ten przyrost jest mniejszy w porównaniu do początkowego. W odróżnieniu od dotychczas badanych struktur nanostożek cechuje zmienna średnica - w miarę zanurzania w dwuwarstwie jego średnica zwiększa się, co jest czynnikiem decydującym o takiej charakterystyce wykresu siły. Następnie siła stabilizuje się, po czym zaczyna spadać w miarę opuszczania dwuwarstwy przez nanostrukturę.

Nanostożek silnie oddziałuje z lipidami tworzącymi błonę, czego skutkiem jest znaczna ilość molekuł wyrwanych podczas procesu przebijania. Jest to średnio 42.3 i 30.7 cząsteczek dla, odpowiednio, małej i dużej prędkości. Kolejnym negatywnym skutkiem tak silnych interakcji jest duże ugięcie zarówno górnej, jak i dolnej warstwy (rys. 3). Dyslokacja atomów C2 fosfolipidów jest większa w przypadkach, gdy indenter dotarł na większą głębokość oraz dla większej prędkości przebijania.

Tak duże ugięcie dwuwarstwy fosfolipidowej musi skutkować zmianami w jej strukturze, co pokazują wykresy profili gęstości (rys. 4). Widać na nim jak granica pomiędzy górną i dolną warstwą lipidów staje się mniej ostra. Dodatkowo, na rys. 4b widać z lewej strony charakterystyczny ogon pochodzący od lipidów wyrwanych z błony.

W omawianym manuskrypcie podejmowane jest także zagadnienie wycofywania nanostożka, zatrzymanego na dwóch różnych głębokościach indentacji. Siła i praca, jak to obrazuje rys. 6, jest większa przy wycofywaniu z większej głębokości. Większa prędkość usuwania także wymaga większej siły. Co za tym idzie, praca wykonana podczas tego procesu także jest większa.

Także ilość lipidów wyrwanych z dwuwarstwy potwierdza wcześniejsze wnioski dotyczące zasadności przeprowadzania tego procesu szybko (tabela 2). Powyższy wniosek potwierdza również rys. 7, na którym widać, że dla mniejszej prędkości indentera lipidy błonowe stosunkowo łatwo nadążają za nim tworząc w ten sposób wybrzuszenie na powierzchni dwuwarstwy fosfolipidowej.

W tabeli 2 widoczna jest również bardzo duża różnica w ilości oderwanych od błony molekuł w kontekście początkowej głębokości, na której znajduje się nanostożek. Otrzymany wynik sugeruje, żeby podczas indentacji membrany nanostrukturą, celem np. wprowadze-

nia substancji do wnętrza komórki, nie wprowadzać indentera głęboko do wnętrza komórki. Szkodliwość zbyt głębokiej indentacji potwierdza także rys. 8, na którym są pokazane profile gęstości. Po wycofywaniu nanostozka z mniejszej głębokości indentacji dwuwarstwa stosunkowo łatwo powróciła do konfiguracji zbliżonej do początkowej. Wycofywanie nanostruktury z większej głębokości skutkuje większymi zmianami w ułożeniu lipidów w błonie. Z prawej strony wykresów 8b i d widoczne są także ogony, których obecność należy łączyć z wyrwanymi lipidami.

Proces samoregeneracji dwuwarstwy fosfolipidowej po wycofaniu z niej różnych nanostruktur (CNT, SiCNT, grafen, nanostozek) omawiany jest także w zatwierdzonym do publikacji manuskrypcie zatytułowanym "Self-sealing properties of phospholipid membranes after interactions with various nanostructures - MD study". Nacisk jest tam położony na dyskusję profilu gęstości i dyslokacji atomów C2 szkieletu glicerolowego fosfolipidów, jednak nie w całej dwuwarstwie, a jedynie w wycinku pokazanym na rys. 2. Podana jest także ilość wyrwanych z błony lipidów.

W przypadku wszystkich użytych nanostruktur na wykresach profili gęstości, tzn. rys. 3, 5 (górne panele) i 7 (lewy panel) widać ślady pozostałe po procesie indentacji. Czarne krzywe na wymienionych rysunkach sugerują zmniejszoną gęstość lipidów w środku dwuwarstwy, co jest jednoznaczne z mniejszą ilością molekuł w tym obszarze. Jednak w miarę upływu czasu lub wysuwania nanostruktury z dwuwarstwy profile gęstości na całej szerokości dwuwarstwy stają się bardziej równomierne sugerując, że lipidy błonowe wypełniają pustkę pozostałą po indenterze.

Wycofywanie nanostruktury z dwuwarstwy powoduje, że jej fragment podąża za indenterem, co jest widoczne na wykresach dyslokacji atomów C2 (rys. 4 i 5 - tylko dolne panele). Jednak również w tym przypadku dwuwarstwa fosfolipidowa szybko, bo już po upływie niecałych 3 ns dla prędkości 0.5 m/s wraca do konfiguracji, w której atomy C2 fosfolipidów w badanym wycinku są ułożone wzdłuż osi y prawie równomiernie.

Ostatnia dyskutowana w manuskrypcie wielkość to ilość lipidów wyrwanych z dwuwarstwy fosfolipidowej podczas wycofywania i wcześniejszej indentacji (tabela 1). Ilość usuniętych molekuł wydaje się dla niektórych przypadków dość duża, jednak w rzeczywistym przypadku będzie brana pod uwagę tylko ilość molekuł na zewnętrznej powierzchni nanostruktury, ponieważ środek będzie wypełniony substancją, którą należy dostarczyć do komórki. Należy także przypuszczać, że będzie prawdopodobnie użyta nanostruktura zamknięta, więc

lipidy błonowe nie będą w stanie znaleźć się w jej środku podczas indentacji, a to właśnie w czasie tego procesu mają szansę tam trafić. Z tych powodów, analizując w tabeli numer 2 ilości molekuł, które się przyczepiły do zewnętrznej powierzchni nanostruktury można zauważyć, że są one bardzo niewielkie - pojedyncze lipidy w pojedynczych przypadkach. Ten wynik bardzo dobrze rokuje w kontekście wykorzystania nanostruktur jako kontenerów na substancje dostarczane do wnętrza komórki, np. w terapiach celowanych.

Rozdział 5

Informacja o wykazywaniu się istotną aktywnością naukową, realizowaną w więcej niż jednej uczelni, instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej

W ramach prowadzonej działalności naukowej nawiązałem współpracę z badaczami spoza jednostki w kraju i za granicą, czego potwierdzeniem jest współautorstwo publikacji naukowych. Należy tutaj wymienić między innymi:

prof. Jannisa Samiosa - obecnie emerytowany; był zatrudniony w Uniwersytecie w Atenach; w zakresie jego zainteresowań znajdują się symulacje komputerowe dynamiki molekularnej; autor lub współautor 85 publikacji naukowych; według Google Scholar cytowany ponad 2200 razy; h-index 26; dzięki współpracy z prof. Jannisem Samiossem udało się zamodelować i użyć w symulacjach nanorurkę węglowo - krzemową, co zaowocowało publikacjami "Interaction Between Silicon-Carbide Nanotube and Cholesterol Domain. A Molecular Dynamics Simulation Study" [46] oraz "Modeling the Impact of Silicon-Carbide Nanotube on the Phospholipid Bilayer Membrane: Study of Nanoindentation and Removal Processes via Molecular Dynamics Simulation" [26].

prof. Thorstena Pöschela - profesor fizyki Uniwersytetu w Erlangen-Norymberdze; autor lub współautor ponad 300 publikacji naukowych; według Google Scholar cytowany blisko 12000 razy; h-index 51; z prof. Thorstenem Pöschelem nawiązałem współpracę podczas prowadzenia badań do atrykułu wysłanego do recenzji w czasopiśmie Archives of Biochemistry and Biophysics i zatytułowanego "Influence of silicon nanocone on cell membrane self-sealing capabilities for targeted drug delivery - computer simulation study", gdzie udzielił cennych wskazówek dotyczących samego procesu badawczego jak i interpretacji otrzymanych wyników. Chciałbym kontynuować współpracę z prof. Pöschelem w zagadnieniu dotyczącym symulacji komputerowych przesuwania warstw grafenowych pomiędzy warstwami fosfolipidowymi co, mam nadzieję, zaowocuje publikacją dotyczącą głębszego poznania mechanizmu biolubrykacji/superlubrykacji.

prof. Per M. Claessona - profesor Królewskiego Instytutu Technologicznego KTH w Sztokholmie; autor lub współautor ponad 400 publikacji naukowych; według Google Scholar cytowany ponad 21000 razy; h-index 75; we współpracy z prof. Per Claessonem został opublikowany artykuł "Albumin-hyaluronan interactions: Influence of ionic composition probed by molecular dynamics" [53]

prof. dr hab. Piotra Cysewskiego - kierownika Katedry Chemii Fizycznej Collegium Medicum UMK, Bydgoszcz. Autor lub współautor 135 publikacji; cytowany blisko 1500 razy; h-index 20; u prof. Cysewskiego przebywałem stacjonarnie w sierpniu 2023 roku i wygłosiłem wykład dotyczący prowadzonych przeze mnie badań. Rozmawialiśmy także o poszerzeniu współpracy poprzez prowadzenie wspólnych badań dotyczących chitozanu oraz chlorku choliny.

dr inż. Piotra Beldowskiego - adiunkt na Wydziale Technologii i Inżynierii Chemicznej Politechniki Bydgoskiej; afiliowany także w Królewskim Instytucie Technologicznym KTH w Sztokholmie; autor lub współautor ponad 30 publikacji naukowych; według Google Scholar cytowany 372 razy; h-index 10; współpraca z dr. Piotrem Beldowskim trwa od kilku lat i wciąż się rozwija; systematycznie, co kilka tygodni (w miarę potrzeb nawet częściej), odbywamy spotkania naukowe korzystając z platformy Google Meet; współpraca zaowocowała następującymi publikacjami: "Application of Graphene as a Nanoindenter Interacting

with Phospholipid Membranes-Computer Simulation Study” [34], ”Steered Molecular Dynamics of Lipid Membrane Indentation by Carbon and Silicon-Carbide Nanotubes-The Impact of Indenting Angle Uncertainty” [39], ”Albumin-Hyaluronan Interactions: Influence of Ionic Composition Probed by Molecular Dynamics” [53].

dr Szymona Starzonka - Uniwersytet w Ljublanie; autor lub współautor ponad 30 publikacji naukowych; według Google Scholar cytowany 395 razy; h-index 11; dr Szymon Starzonek specjalizuje się w ciekłych kryształach; współpraca zaowocowała publikacją ”Impact of polarized nanotube surface on ultrathin mesogen film properties: Computer simulation study” [54] oraz, znajdującym się obecnie w recenzji w czasopiśmie Physical Review Letters E manuskrytem ”2D phases of confined 5-cyano-biphenyl - computer simulation study”.

Stevena Yuvana - doktorant fizyki Uniwersytetu Wschodniej Karoliny; współpraca dotyczyła analizy wyników badań i przygotowywania publikacji ”Application of Graphene as a Nanoindenter Interacting with Phospholipid Membranes-Computer Simulation Study” [34] oraz ”Steered Molecular Dynamics of Lipid Membrane Indentation by Carbon and Silicon-Carbide Nanotubes-The Impact of Indenting Angle Uncertainty” [39].

dr Beatę Marciniak - adiunkt na Wydziale Telekomunikacji Informatyki i Elektrotechniki Politechniki Bydgoskiej; autorka ponad 30 publikacji naukowych; współpraca dotyczyła publikacji ”Steered Molecular Dynamics of Lipid Membrane Indentation by Carbon and Silicon-Carbide Nanotubes-The Impact of Indenting Angle Uncertainty” [39] oraz będącego obecnie w recenzji w czasopiśmie Archives of Biochemistry and Biophysics manuskrytu ”Influence of silicon nanocone on cell membrane self-sealing capabilities for targeted drug delivery - computer simulation study”.

Spośród badaczy spoza Uniwersytetu Śląskiego, z którymi została nawiązana współpraca podczas przygotowywania publikacji ”Albumin-Hyaluronan Interactions: Influence of Ionic Composition Probed by Molecular Dynamics” [34] należy jeszcze wymienić:

- prof. dr hab. Alinę Sionkowską; Uniwersytet Mikołaja Kopernika w Toruniu,

- dr inż. Macieja Przybyłka; Katedra Chemii Fizycznej Collegium Medicum UMK, Bydgoszcz, oprócz współpracy w formie online u dr Przybyłka przebywałem stacjonarnie w sierpniu 2023 roku i wygłosiłem wykład dotyczący prowadzonych przeze mnie badań. Rozmawialiśmy także o poszerzeniu współpracy poprzez prowadzenie wspólnych badań dotyczących chitozanu oraz chlorku choliny.
- Andrę Dedinaite; Królewski Instytut Technologiczny KTH, Instytuty Badawcze RISE Szwecja,
- dr Floriana Wielanda; Helmholtz-Zentrum Hereon, Geesthacht, Germany.

Podczas mojej pracy badawczej korzystałem z zasobów innych jednostek oraz uczestniczyłem w sesjach sprawozdawczych dla grantobiorców:

- Akademickie Centrum Komputerowe Cyfronet, Akademia Górniczo - Hutnicza w Krakowie - grant obliczeniowy
- Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Uniwersytetu Warszawskiego - grant obliczeniowy
- Centrum Informatyczne Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej - grant obliczeniowy

Stosowne podziękowania za udzielenie dostępu do zasobów obliczeniowych znajdują się w sekcjach Acknowledgments publikacji.

Rozdział 6

Informacja o osiągnięciach dydaktycznych, organizacyjnych oraz popularyzujących naukę lub sztukę

6.1 Informacja o działalności dydaktycznej:

W okresie zatrudnienia na stanowisku adiunkta prowadziłem zajęcia laboratoryjne ze studentami kierunków Informatyka Stosowana oraz Fizyka Medyczna. Były to następujące przedmioty:

- Algorytmy i programowanie; rok akademicki 2022/2023
- Architektura komputerów; rok akademicki 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019, 2019/2020, 2020/2021
- Grafika inżynierska; rok akademicki 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019, 2019/2020, 2020/2021, 2021/2022
- Kurs C; rok akademicki 2018/2019, 2019/2020, 2020/2021
- Programowanie cz. 1; rok akademicki 2015/2016, 2016/2017
- Programowanie cz. 2; rok akademicki 2015/2016

- Systemy wbudowane; rok akademicki 2017/2018, 2018/2019, 2019/2020, 2020/2021, 2021/2022, 2022/2023
- Użytkowanie oprogramowania inżynierskiego; rok akademicki 2015/2016, 2016/2017,
- Wstęp do informatyki; rok akademicki 2018/2019, 2019/2020, 2020/2021, 2021/2022, 2022/2023

Byłem recenzentem następujących prac inżynierskich na kierunku Informatyka Stosowana:

- Autonomiczny system sterowania robotem sprzątającym
- Optymalizacja gilotynowego rozkroju szkła - aplikacja python
- Aplikacja internetowa monitorująca mini-szklarnię
- Aplikacja sieciowa do zarządzania i grupowania zdjęć za pomocą lokalizacji i mapy
- Wykorzystanie uczenia maszynowego w urządzeniu HID
- Klasyfikacja typów uderzeń tenisowych na podstawie zdjęć przy użyciu uczenia maszynowego

W latach 2010-2018 byłem czynnym nauczycielem Fizyki w II Liceum Ogólnokształcącym im. Marii Konopnickiej w Katowicach. Nauczałem na poziomie podstawowym i rozszerzonym. W tym czasie intensywnie popularyzowałem fizykę i naukę ogólnie, organizując rozmaite wydarzenia zarówno na terenie szkoły jak i poza nią. Uczestniczyłem także w szkoleniach dotyczących dydaktyki oraz pracy z uczniem zgodnie z wymaganiami ustawy Karta Nauczyciela. Dzięki temu doskonaliłem swój warsztat dydaktyczny.

Pełniłem funkcję promotora pomocniczego mgra Mateusza Pabiszczaka. Rozprawa doktorska była zatytułowana "Napełnianie bioagregatów fosfolipidowych substancjami polarnymi i niepolarnymi – symulacje komputerowe".

6.2 Informacja o działalności organizacyjnej

- Jestem opiekunem roku na kierunku Informatyka Stosowana (rocznik rozpoczynający studia w październiku 2022 roku).

- Pełniłem funkcję sekretarza komisji rekrutacyjnej na kierunku Informatyka Stosowana (rocznik rozpoczynający studia w 2022 roku).
- Dwukrotnie pełniłem funkcję przewodniczącego komisji rekrutacyjnej na kierunku Informatyka Stosowana (rok 2016 i 2019).
- Pełniłem funkcję Lokalnego Koordynatora Bezpieczeństwa Informacji w Instytucie Fizyki (powołanie w roku 2015).
- Dwukrotnie pełniłem funkcję Administratora Systemów Informatycznych na wydziale/instytucie (powołanie w roku 2018 i 2019).
- Pełniłem funkcję członka komisji następujących prac inżynierskich na kierunku Informatyka Stosowana:
 - Klient systemu zarządzania tokiem studiów - aplikacja mobilna
 - BeeSmart - aplikacja internetowa do monitorowania warunków wewnątrz ula
 - Projekt i implementacja serwera RESTful API pod aplikację mobilną dotyczącą diety i treningu z wykorzystaniem Azure'a pipeline, Docker'a oraz języka Python z przykładową implementacją mobilną wybranych punktów końcowych w języku JavaScript
 - Aplikacja mobilna do zdalnego nadzorowania pasieki
 - Projekt i implementacja aplikacji mobilnej motywującej do aktywności fizycznej
 - Projekt dynamicznej witryny internetowej dla jednostki oświatowej
 - Aplikacja mobilna do zarządzania promocjami bankowymi
 - Aplikacja mobilna do zarządzania systemem inteligentnego domu opartego o protokół ZigBee
 - Automatyczny system oceny tarcz strzeleckich

Rozdział 7

Inne informacje dotyczące kariery zawodowej

7.1 Recenzje artykułów naukowych

Niestety nie prowadziłem ścisłej ewidencji recenzowanych manuskryptów. Spośród tych, które jestem w stanie wymienić i, w przypadku zaistnienia takiej konieczności, udokumentować są następujące czasopisma:

- Molecular Simulation, w roku 2022
- Chemical Physics Letters, w roku 2018
- Archives of Biochemistry and Biophysics, w roku 2016
- The Journal of Physical Chemistry (recenzje trzech artykułów w 2015 roku)

7.2 Granty obliczeniowe

Jak kilkakrotnie wspomniano w autoreferacie, badane układy składały się w skrajnych przypadkach z około 150000 atomów. Z powodu bardzo dużej mocy obliczeniowej wymaganej do przeprowadzenia w pełni atomistycznych symulacji tak dużych układów ubiegałem się o możliwość wykonania obliczeń na superkomputerach. Dzięki uprzejmości centrów obliczeniowych obliczenia mogłem wykonywać na:

- Superkomputerze MARS, znajdującym się w zasobach ACK CYFRONET AGH

- Superkomputerze Nostromo znajdującym się w zasobach ICM Uniwersytetu Warszawskiego (Grant numer G53-6)
- Superkomputerze Okeanos znajdującym się w zasobach ICM Uniwersytetu Warszawskiego (Grant numer GB76-32)
- Superkomputerze Tryton, znajdującym się w zasobach CI Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej.
- Infrastrukturze PAAD znajdującej się w zasobach Uniwersytetu Śląskiego

Stosowne wpisy znajdują się w sekcjach Acknowledgments publikacji.

Rozdział 8

Podsumowanie

Na całokształt mojego dorobku naukowego, po uzyskaniu stopnia doktora, składają się 33 publikacje naukowe. Cztery manuskrypty znajdują się w recenzji. 11 spośród publikacji oraz 2 manuskrypty wchodzi w skład osiągnięcia naukowego. Osiem publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe jest punktowanych za 100 lub więcej punktów. Jedynie w jednej z publikacji wchodzących w skład osiągnięcia naukowego nie jestem pierwszym autorem. Także w dwóch manuskryptach znajdujących się w recenzji jestem wymieniony jako pierwszy autor.

W ostatnich latach nawiązuję coraz szerszą współpracę naukową z partnerami zarówno w kraju, jak i za granicą. Mam nadzieję, że pozwoli mi to poszerzać wiadomości, być na bieżąco z najnowszymi osiągnięciami w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych oraz doskonalić warsztat pracy.

Z tego też powodu postanowiłem zostać członkiem Polskiego Twórcystwa Fizycznego.

Liczba moich cytowań wynosi odpowiednio:

- Według bazy Web of Science: 218
- według bazy Scopus: 240
- według bazy Google Scholar: 302

Mój index Hirscha wynosi odpowiednio:

- Według bazy Web of Science: 9
- według bazy Scopus: 9
- według bazy Google Scholar: 10

Bibliografia

- [1] S. Reich, C. Thomsen i J. Maultzsch. *Carbon Nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties*. Weinheim: Wiley-VCH, 2004. ISBN: 3527403868.
- [2] M. Dresselhaus, G. Dresselhaus i P. Avouris. *Carbon Nanotubes*. Wydanie pierwsze. Heidelberg: Springer Berlin, 2001. ISBN: 978-3-540-41086-7.
- [3] S. Iijima. “Helical microtubules of graphitic carbon”. W: *nature* 354.6348 (1991), s. 56–58.
- [4] S. Iijima, T. Ichihashi i Y. Ando. “Pentagons, heptagons and negative curvature in graphite microtubule growth”. W: *Nature* 356.6372 (1992), s. 776–778.
- [5] D. Bethune, C. Kiang, M. de Vries, G. Gorman, R. Savoy i J. Vazquez. “Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls”. W: *Nature* 363 (1993), s. 605–607. DOI: [10.1038/363605a0](https://doi.org/10.1038/363605a0).
- [6] A. Abdulhameed, M. M. Halim i I. A. Halin. “Dielectrophoretic alignment of carbon nanotubes: theory, applications, and future”. W: *NANOTECHNOLOGY* 34.24 (czer. 2023). ISSN: 0957-4484. DOI: [10.1088/1361-6528/acc46c](https://doi.org/10.1088/1361-6528/acc46c).
- [7] B. Ju, F. Tian, K. Shi i P. Zhang. “Influence of ambient temperature and structural parameters on thermal conductivity of carbon nanotube arrays after secondary segmentation”. W: *INTERNATIONAL JOURNAL OF HEAT AND MASS TRANSFER* 210 (sierp. 2023). ISSN: 0017-9310. DOI: [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124154](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.124154).
- [8] Y. Z. Song, Y. Song i H. Zhong. “Gold nanoparticle/double-walled carbon nanotube-modified glassy carbon electrode and its application”. W: *GOLD BULLETIN* 44.2 (2011), s. 107–111. ISSN: 2364-821X. DOI: [10.1007/s13404-011-0016-7](https://doi.org/10.1007/s13404-011-0016-7).

- [9] B. Q. Wei, R. Vajtai i P. M. Ajayan. “Reliability and current carrying capacity of carbon nanotubes.” W: *Applied Physics Letters* 79 (2001), s. 1172–1174. DOI: [10.1063/1.1396632](https://doi.org/10.1063/1.1396632). URL: <https://doi.org/10.1063/1.1396632>.
- [10] N. Lee, W. Choi, W. Yi, Y. Jin, Y. Choi, J. Jung, S. You, J. You, C. Lee, S. Cho i J. Kim. “The carbon-nanotube based field-emission displays for future large and full color displays”. W: *MICROPROCESSES AND NANOTECHNOLOGY 2000, DIGEST OF PAPERS*. International Microprocesses and Nanotechnology Conference, UNIV TOKYO, KOMABA CAMPUS, TOKYO, JAPAN, JUL 11-13, 2000. Japan Soc Appl Phys; IEEE, Electr Devices Soc; Amer Vacuum Soc; Assoc Super Adv Electr Technol; Inst Elect Engineers Japan; Inst Electr, Informat & Commun Engineers; Japanese Soc Synchrotron Radiat Res; Japanese Soc Electron Microscopy; Surface Sci Soc Japan; Vacuum Soc Japan. 2000, s. 124–127. ISBN: 4-89114-004-6. DOI: [10.1109/IMNC.2000.872654](https://doi.org/10.1109/IMNC.2000.872654).
- [11] B. Gao, C. Bower, J. Lorentzen, L. Fleming, A. Kleinhammes, X. Tang, L. McNeil, Y. Wu i O. Zhou. “Enhanced saturation lithium composition in ball-milled single-walled carbon nanotubes”. W: *Chemical Physics Letters* 327.1 (2000), s. 69–75. ISSN: 0009-2614. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(00\)00851-4](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(00)00851-4). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261400008514>.
- [12] K. V. Savunthari, C.-H. Yi, J.-Y. Huang, K. Iputera, S.-F. Hu i R.-S. Liu. “All-Solid-State Na-O₂ Batteries with Long Cycle Performance”. W: *ACS APPLIED ENERGY MATERIALS* 5.11 (list. 2022), s. 14280–14289. ISSN: 2574-0962. DOI: [10.1021/acsaem.2c02845](https://doi.org/10.1021/acsaem.2c02845).
- [13] J. Han, K. Huang, X. Su, X. Xiao, X. Gong, H. Wang i J. Cao. “Carbon Nanotube Transistor with Colloidal Quantum Dot Photosensitive Gate for Ultrahigh External Quantum Efficiency Photodetector.” W: *ACS Nano* (2023). DOI: [10.1021/acsnano.3c02064](https://doi.org/10.1021/acsnano.3c02064).
- [14] M. Zhu, P. Lu, X. Wang, Q. Chen, H. Zhu, Y. Zhang, J. Zhou, H. Xu, Z. Han, J. Han, R. Chen, B. Li, L.-M. Peng i Z. Zhang. “Ultra-Strong Comprehensive Radiation Effect Tolerance in Carbon Nanotube Electronics”. W: *SMALL* 19.1 (sty. 2023). DOI: [10.1002/smll.202204537](https://doi.org/10.1002/smll.202204537).

- [15] K. S. Karimov, M. Saleem, Z. M. Karieva, A. Khan i A. Mateen. “CNT-based displacement sensor”. W: *INTERNATIONAL JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH* 103.7 (lip. 2012), s. 897–900. ISSN: 1862-5282. DOI: [10.3139/146.110692](https://doi.org/10.3139/146.110692).
- [16] J. H. Choi, J. H. Noh i C. Choi. “Highly Elastically Deformable Coiled CNT/Polymer Fibers for Wearable Strain Sensors and Stretchable Supercapacitors”. W: *SENSORS* 23.4 (lut. 2023). DOI: [10.3390/s23042359](https://doi.org/10.3390/s23042359).
- [17] G. Wu, H. Du, Y. L. Cha, D. Lee, W. Kim, F. Feyzbar-Khalkhali-Nejad, T.-S. Oh, X. Zhang i D.-J. Kim. “A wearable mask sensor based on polyaniline/CNT nanocomposites for monitoring ammonia gas and human breathing”. W: *SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL* 375 (sty. 2023). DOI: [10.1016/j.snb.2022.132858](https://doi.org/10.1016/j.snb.2022.132858).
- [18] C.-J. Chien, S. S. Deora, P. Chang, D. Li i J. G. Lu. “Flexible Symmetric Supercapacitors Based on TiO₂ and Carbon Nanotubes”. W: *IEEE TRANSACTIONS ON NANOTECHNOLOGY* 10.4 (lip. 2011), s. 706–709. ISSN: 1536-125X. DOI: [10.1109/TNANO.2010.2069569](https://doi.org/10.1109/TNANO.2010.2069569).
- [19] M. Lan, X. Jia, R. Tian, J. Yang, D. Shao, S. Wang, Y. Li, L. Feng, J. Yuan, M. Zhang i H. Song. “Highly redispersible CNT dough for better processibility”. W: *JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE & TECHNOLOGY* 152 (lip. 2023), s. 65–74. ISSN: 1005-0302. DOI: [10.1016/j.jmst.2022.12.028](https://doi.org/10.1016/j.jmst.2022.12.028).
- [20] F. Asghar, B. Murtaza, B. Shakoor, N. Iqbal, M. Shafique, R. Murtaza i I. S. Butler. “Properties, assembly and characterization of carbon nanotubes: their application in water purification, environmental pollution control and biomedicines-a comprehensive review”. W: *CARBON LETTERS* 33.2 (mar. 2023), s. 275–306. ISSN: 1976-4251. DOI: [10.1007/s42823-022-00432-9](https://doi.org/10.1007/s42823-022-00432-9).
- [21] W. Lee i V. Parpura. “Carbon nanotubes as substrates/scaffolds for neural cell growth”. W: *Prog Brain Res* 180 (2009), s. 110–25. DOI: [10.1016/S0079-6123\(08\)80006-4](https://doi.org/10.1016/S0079-6123(08)80006-4).
- [22] N. Saito, Y. Usui, K. Aoki, N. Narita, M. Shimizu, K. Hara, N. Ogiwara, K. Nakamura, N. Ishigaki, H. Kato, S. Taruta i M. Endo. “Carbon nanotubes: biomaterial applications.” W: *Chem Soc Rev* 38(7) (2009), s. 1897–903. DOI: [10.1039/b804822n](https://doi.org/10.1039/b804822n).

- [23] K. Matsumoto, C. Sato, Y. Naka, R. Whitby i N. Shimizu. “Stimulation of neuronal neurite outgrowth using functionalized carbon nanotubes.” W: *Nanotechnology* 21(11) (2010), s. 115101. DOI: [10.1088/0957-4484/21/11/115101](https://doi.org/10.1088/0957-4484/21/11/115101).
- [24] X. Li, Y. Fan i F. Watari. “Current investigations into carbon nanotubes for biomedical application.” W: *Biomed Mater* 5(2) (2010), s. 22001. DOI: [10.1088/1748-6041/5/2/022001](https://doi.org/10.1088/1748-6041/5/2/022001).
- [25] R. Muray, D. Granner i V. Rodwell. *Biochemia Harpera. Ilustrowana*. pl. Wydanie szóste. Warszawa: PZWL, 2015. ISBN: 978-83-200-4554-3.
- [26] P. Raczyński, K. Górny, Z. Dendzik, J. Samios i Z. Gburski. “Modeling the Impact of Silicon-Carbide Nanotube on the Phospholipid Bilayer Membrane: Study of Nanoindentation and Removal Processes via Molecular Dynamics Simulation”. W: *The Journal of Physical Chemistry C* 123 (2019), s. 18726–18733. DOI: doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b05100.
- [27] A. Mavrandonakis, G. E. Froudakis, M. Schnell i M. Mühlhäuser. “From Pure Carbon to SiliconCarbon Nanotubes: An Ab-initio Study”. W: *Nano Letters* 3.11 (2003), s. 1481–1484. DOI: [10.1021/nl10343250](https://doi.org/10.1021/nl10343250). URL: <https://doi.org/10.1021/nl10343250>.
- [28] G. P. Lithoxoos, J. Samios i Y. Carissan. “Investigation of Silicon Model Nanotubes as Potential Candidate Nanomaterials for Efficient Hydrogen Storage: A Combined Ab Initio/Grand Canonical Monte Carlo Simulation Study”. W: *The Journal of Physical Chemistry C* 112.43 (2008), s. 16725–16728. DOI: [10.1021/jp805559a](https://doi.org/10.1021/jp805559a). URL: <https://doi.org/10.1021/jp805559a>.
- [29] T. Taguchi, K. Kodama i S. Shamoto. *Producing single-crystal silicon carbide nanotube used in electronic device, involves preparing polycrystalline silicon carbide nanotube and irradiating ion to penetrate with respect to polycrystalline silicon carbide nanotube*. JP Patent, JP2011001225-A. 2011. URL: <https://www.webofscience.com/wos/alldb/full-record/DIIDW:2011A31999>.
- [30] S. Behzad, R. Moradian i R. Chegel. “Structural and Electronic Properties of Silicon Carbide Nanotubes”. W: *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* 9.11 (2012), s. 1860–1869. DOI: [doi:10.1166/jctn.2012.2597](https://doi.org/10.1166/jctn.2012.2597). URL: <https://www.ingentaconnect.com/content/asp/jctn/2012/00000009/00000011/art00005>.

- [31] J. A. Talla. “Electronic properties of silicon carbide nanotube with Stone Wales defects under uniaxial pressure: A computational study”. W: *Computational Condensed Matter* 19 (2019), e00378. ISSN: 2352-2143. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2019.e00378>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352214319300358>.
- [32] J. Liu, Y. Wang, W. Q. i C. P. *Carbon nanotube-silicon carbide nanowire composite material useful in nanoelectronic device, has one-dimensional nanostructure, where silicon carbide nanowire in composite material grows along length direction of carbon nanotubes*. CN Patent, CN110950323-A. 2020. URL: <https://www.webofscience.com/wos/alldb/full-record/DIIDW:2020282991>.
- [33] T. Taguchi, S. Shamoto, T. Miyazaki i S. Iikubo. *Preparation of biologically active silicon carbide nanotube used as e.g. lightweight dental, involves providing vacuum heat treatment of carbon nanotube and silicon powder and processing resulting silicon carbide with aqueous solution*. JP Patent, JP2013022215-A. 2013. URL: <https://www.webofscience.com/wos/alldb/full-record/DIIDW:2013B77994>.
- [34] P. Raczynski, K. Gorny, P. Beldowski, S. Yuwan i Z. Dendzik. “Application of Graphene as a Nanoindenter Interacting with Phospholipid Membranes-Computer Simulation Study”. W: *Journal of Physical Chemistry B* 124.30 (lip. 2020), s. 6592–6602. ISSN: 1520-6106. DOI: [10.1021/acs.jpccb.0c02319](https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.0c02319).
- [35] E. J. Wallace i M. S. P. Sansom. “Blocking of carbon nanotube based nanoinjectors by lipids: A simulation study”. W: *Nano Letters* 8 (2008), s. 2751–2756. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl801217f>.
- [36] S. Pogodin i V. Baulin. “Can a Carbon Nanotube Pierce through a Phospholipid Bilayer?” W: *ACS Nano* 4 (2010), s. 5293–5300. DOI: <https://doi.org/10.1021/nl1016549>.
- [37] P. Raczynski, K. Gorny, M. Pabiszczak i Z. Gburski. “Nanoindentation of biomembrane by carbon nanotubes - MD simulation”. W: *Computational Materials Science* 70 (kw. 2013), s. 13–18. ISSN: 0927-0256. DOI: [10.1016/j.commatsci.2012.12.031](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.12.031).
- [38] P. Raczynski, K. Gorny, V. Raczynska, M. Pabiszczak, Z. Dendzik i Z. Gburski. “On the impact of nanotube diameter on biomembrane indentation - Computer

- simulations study”. W: *Biochimica et Biophysica Acta-Biomembranes* 1860.2 (lut. 2018), s. 310–318. ISSN: 0005-2736. DOI: [10.1016/j.bbamem.2017.10.030](https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2017.10.030).
- [39] P. Raczynski, K. Gorny, P. Beldowski, S. Yuwan, B. Marciniak i Z. Dendzik. “Steered Molecular Dynamics of Lipid Membrane Indentation by Carbon and Silicon-Carbide Nanotubes-The Impact of Indenting Angle Uncertainty”. W: *Sensors* 21.21 (list. 2021). DOI: [10.3390/s21217011](https://doi.org/10.3390/s21217011).
- [40] V. Gangupomu i F. Capaldi. “Interactions of Carbon Nanotube with Lipid Bilayer Membranes”. W: *Journal of Nanomaterials* 2011 (2011), Art. No. 830436. DOI: <https://doi.org/10.1155/2011/830436>.
- [41] J. MacKerell A. D., D. Bashford, M. Bellott, R. L. Dunbrack, J. D. Evanseck, M. J. Field, S. Fischer, J. Gao, H. Guo, S. Ha, D. Joseph-McCarthy, L. Kuchnir, K. Kuczera, F. T. K. Lau, C. Mattos, S. Michnick, T. Ngo, D. T. Nguyen, B. Prodhom, I. Reiher W. E., B. Roux, M. Schlenkrich, J. C. Smith, R. Stote, J. Straub, M. Watanabe, J. Wiorkiewicz-Kuczera, D. Yin i M. Karplus. “All-Atom Empirical Potential for Molecular Modeling and Dynamics Studies of Proteins”. W: *Journal of Physical Chemistry B* 102 (1998), s. 3586–3616. DOI: [10.1021/jp973084f](https://doi.org/10.1021/jp973084f).
- [42] J. B. Klauda, R. M. Venable, J. A. Freites, J. W. O’Connor, D. J. Tobias, C. Mondragon-Ramirez, I. Vorobyov, A. D. MacKerell i R. W. Pastor. “Update of the CHARMM All-Atom Additive Force Field for Lipids: Validation on Six Lipid Types”. W: *The Journal of Physical Chemistry B* 114.23 (2010). PMID: 20496934, s. 7830–7843. DOI: [10.1021/jp101759q](https://doi.org/10.1021/jp101759q). URL: [10.1021/jp101759q](https://doi.org/10.1021/jp101759q).
- [43] J. C. Phillips, R. Braun, W. Wang, J. Gumbart, E. Tajkhorshid, E. Villa, C. Chipot, R. D. Skeel, L. Kale i K. Schulten. “Scalable molecular dynamics with NAMD”. W: *Journal of Computational Chemistry* 26 (2005), s. 1781–1802. DOI: [10.1002/jcc.20289](https://doi.org/10.1002/jcc.20289).
- [44] Z. Gburski, K. Gorny i P. Raczynski. “The impact of a carbon nanotube on the cholesterol domain localized on a protein surface”. W: *Solid State Communications* 150.9-10 (mar. 2010), s. 415–418. ISSN: 0038-1098. DOI: [10.1016/j.ssc.2009.12.005](https://doi.org/10.1016/j.ssc.2009.12.005).
- [45] Z. Gburski i P. Raczynski. “Influence of Carbon Nanotube on Cholesterol Lodgment: Molecular Dynamics Simulation”. W: *Reviews on Advanced Materials Science*

- 23.1 (mar. 2010). 5th Workshop on Functional and Nanostructured Materials, Lviv, UKRAINE, AUG 31-SEP 06, 2008, s. 64–69. ISSN: 1606-5131.
- [46] P. Raczyński, K. Górny, J. Samios i Z. Gburski. “Interaction Between Silicon–Carbide Nanotube and Cholesterol Domain. A Molecular Dynamics Simulation Study.” W: *The Journal of Physical Chemistry C* 118 (2014), s. 30115–30119. DOI: [10.1021/jp505532f](https://doi.org/10.1021/jp505532f).
- [47] P. Raczynski, V. Raczynska, K. Gorny i Z. Gburski. “Properties of ultrathin cholesterol and phospholipid layers surrounding silicon-carbide nanotube: MD simulations”. W: *Archives of Biochemistry and Biophysics* 580 (sierp. 2015), s. 22–30. ISSN: 0003-9861. DOI: [10.1016/j.abb.2015.06.008](https://doi.org/10.1016/j.abb.2015.06.008).
- [48] P. Raczynski i Z. Gburski. “Molecular Dynamics Simulations of the Dynamics of Small Cholesterol Systems”. W: *Nanophysics, nanomaterials, interface studies and applications*. T. 195. Springer International Publishing, 2017, s. 595–601. ISBN: 978-3-319-56422-7; 978-3-319-56244-5. DOI: [10.1007/978-3-319-56422-7_44](https://doi.org/10.1007/978-3-319-56422-7_44).
- [49] P. Raczynski. “Properties of Ultrathin Lipid Layers Surrounding Boron Nitride Nanotube: Computer Simulation Study”. W: *Nanophotonics, Nanooptics, Nanobiotechnology, and Their Applications*. Springer International Publishing, 2019, s. 399–408. ISBN: 978-3-030-17755-3.
- [50] P. Raczynski, K. Gorny, A. Dawid i Z. Gburski. “Delivery of nitric oxide to the interior of mammalian cell by carbon nanotube: MD simulation”. W: *Archives of Biochemistry and Biophysics* 554 (lip. 2014), s. 6–10. ISSN: 0003-9861. DOI: [10.1016/j.abb.2014.04.014](https://doi.org/10.1016/j.abb.2014.04.014).
- [51] V. Raczynska, P. Raczynski, K. Gorny i Z. Gburski. “Nanoindentation of DMPC Layer by Nanotubes of Various Diameters”. W: *Nanophysics, nanophotonics, surface studies and applications*. T. 183. Springer International Publishing, 2016, s. 23–31. ISBN: 978-3-319-30737-4; 978-3-319-30736-7. DOI: [10.1007/978-3-319-30737-4_3](https://doi.org/10.1007/978-3-319-30737-4_3).
- [52] J. K. Li, R. M. A. Sullan i S. Zou. “Atomic Force Microscopy Force Mapping in the Study of Supported Lipid Bilayers”. W: *Langmuir* 27 (2011), s. 1308–1313. DOI: <https://doi.org/10.1021/la103927a>.

- [53] P. Beldowski, M. Przybyłek, P. Raczynski, A. Dedinaite, K. Gorny, F. Wieland, Z. Dendzik, A. Sionkowska i P. M. Claesson. “Albumin-Hyaluronan Interactions: Influence of Ionic Composition Probed by Molecular Dynamics”. W: *International Journal of Molecular Sciences* 22.22 (list. 2021). DOI: [10.3390/ijms222212360](https://doi.org/10.3390/ijms222212360).
- [54] K. Gorny, V. Raczynska, P. Raczynski, Z. Dendzik i S. Starzonek. “Impact of polarized nanotube surface on ultrathin mesogen film properties: Computer simulation study”. W: *PHYSICAL REVIEW E* 99.2 (lut. 2019). ISSN: 2470-0045. DOI: [10.1103/PhysRevE.99.022701](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.99.022701).