



## Lista grantów badawczych

Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak

### Aktualne granty

1. „Quantum Crystallographic Quest for New Polymorphic Forms of Ice and Hydrates” in Polish: „Kwantowo-krystalograficzne poszukiwania nowych odmian polimorficznych lodu i hydratów”, OPUS 21, NCN nu DEC-2021/41/B/ST4/03010, **3 978 400 PLN**, 01/03/2022 r. – 28/02/2026 r.
2. **HORIZON-MSCA-2022-DN-01-01, Acronym eRaDicate**, Innovative ligands for nuclear receptors to eradicate cancer relapse, grant przyznany w 2023 r., realizowany w latach 2024-2028, Krzysztof Woźniak – wykonawca.
3. **SPONSOR RESEARCH AGREEMENT** z firmą Moleculin (USA) dotyczący krystalizacji farmaceutyków, realizowany w latach 2022-2025, Krzysztof Woźniak, PI.
4. **IDUB Visiting professorship** for Prof. P. Dera (Univ. of Hawaii, Honolulu, USA).
5. **IDUB Visiting professorship** for Prof. J. Majewski (NSF, USA).

### Zakończone granty

1. „Advancing quantum crystallography for better insight into structure and properties of crystals”, in Polish: „Rozwijając krystalografię kwantową w celu lepszego wejścia w strukturę i właściwości kryształów”, OPUS 16; NCN nu UMO-2018/31/B/ST4/02142, **2 194 600 PLN**, 01/10/2019 r. - 30/09/2023 r.
2. „Phase transitions in minerals induced by pressure and studied by experimental charge densities - feasibility studies” in Polish: „Przejęcia fazowe w minerałach indukowane ciśnieniem i badane za pomocą eksperymentalnych rozkładów gęstości elektronicznej – studium wykonalności”, OPUS 17; NCN nu DEC-2019/33/B/ST10/02671, **2 543 200 PLN**, 02/04/2020 r. - 31/03/2024 r.
3. „Infrastructure for Cryoelectron Microscopy and Electron Diffraction Laboratory”, in Polish: „Infrastruktura dla Laboratorium Kriomikroskopii i Dyfrakcji Elektronowej”, UW IDUB programme, Decision nu BOB-IDUB-622-51/2021, **ca. 5 mln PLN**.

## Skład osobowy



### Kierownik Pracowni

Prof. dr hab. Krzysztof Woźniak

### Pracownicy

Dr Michał Chodkiewicz  
Dr Roman Gajda  
Dr Tomasz Góral (CeNT UW)  
Dr Szymon Sutula (CeNT UW)  
Dr Damian Trzybiński  
Dr Magdalena Woźnińska  
Dr Marcin Ziemiński  
Dr Piotr Rejnhardt  
Dr Marlena Kisiąła  
Mgr Aqsa Jabeen  
Mgr Małgorzata Krupska  
Mgr Magdalena Chludzińska

### Doktoranci

Mgr Agnieszka Huć (zatrudniona w granicie)  
Mgr Aqsa Jabeen (zatrudniona w granicie)

## Tematyka badawcza

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

### Nasza grupa badawcza

- rozwiija nowe metody krystalografii kwantowej, w szczególności ukladanie metodą atomów Hirshfelda względem danych rentgenowskich elektronicznych i waliduje użyteczność tych metod;
  - wykonuje badania strukturalne (oraz badania gęstości elektronicznej) kryształów związków organicznych, nieorganicznych i makromolekularnych;
  - stosujemy także dyfrakcję elektroniczną w badaniach strukturalnych nanokryształów;
  - badamy kryształy związków o znaczeniu farmaceutycznym, ważne związki biologiczne lub biochemiczne, minerały i związki nieorganiczne, etc.;
  - badamy polimorfizm lodu i hydratów oraz poszukujemy nowych odmian polimorficznych lodu;
  - badamy ruchy termiczne atomów i cząsteczek, a także procesy krystalizacji;
  - badamy strukturę molekularną i elektroniczną kryształów pod ciśnieniem;
  - badamy naturę przejść fazowych w kryształach pod wysokim ciśnieniem i w warunkach zmiennej temperatury;
- Większość badań wykonujemy w ramach posiadanych przez nas grantów.

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



Nasze niezle wyposażone laboratorium krystalograficzne



Wizyta prof. Ute Kolb na Uniwersytecie Warszawskim na zaproszenie naszej grupy.



Dr Magdalena Woźnińska na XX-tej konferencji SAGAMORE, Indie.



Spotkanie grupowe w restauracji Jeff's.



Graduacja dr Martydy Izert-Nowakowskiej - gratulacje JM Rektora prof. dr hab. Alojzego Z. Nowaka.



Na pomiarach w Oak Ridge; dr Sylwia Pawłodziś, prof. dr hab. Krzysztof Woźniak, mgr Agnieszka Huć oraz dr Roman Gajda.



Dr hab. Wojciech Ślawiński, prof. UW, dr Roman Gajda oraz dr Tomasz Góral podczas spotkania grupowego w restauracji Jeff's.



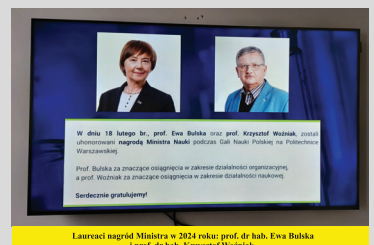
Wizyta prof. Dubrowskiego (w środku) wraz z prof. Dubrowską (po prawej) w laboratorium naszej grupy badawczej.



Dr Magdalena Woźnińska na the Harbour Bridge i Opery w Sydney, w Australii.



Wykładowcy w sesji mineralogicznej na Europejskiej Konferencji Krystalograficznej w Padwie w 2024 roku.



Lauraci nagród Ministra w 2024 roku: prof. dr hab. Ewa Baska i prof. dr hab. Krzysztof Woźniak.

**Nasze publikacje naukowe**

**Lista publikacji naukowych**

1. M. Woźniak, A. A. Hoser, M. L. Chodkiewicz, K. Woźniak, Enhancing Hydrogen Positions in X-ray Structures of Transition Metal Hydride Complexes with Dynamic Quantum Crystallography, *IUCr*, 11(1) (2024) 45-56, <https://doi.org/10.1107/S20525252300951X>, **IF = 2.9**
2. A. Pieczka, R. Kristiansen, M. Stachowicz, M. Dumańska-Słowik, B. Gołębiowska, M. P. Sek, K. Nejbert, J. Kotowski, B. Marciniak-Maliszewska, A. Szuskiewicz, E. Szeleg, K. Woźniak, Heffiteite, ideally Ca<sub>2</sub>(Al<sub>2</sub>Se)(Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>)(SiO<sub>4</sub>)O(H), the first scandium epidote-supergrup mineral from Jordanów Śląski, Lower Silesia (Poland) and from Heftefjern, Tordal (Norway), *Mineralogical Magazine*, 88 (2024) 228-243, <https://doi.org/10.1180/mgm.2023.98>, **IF = 2.8**
3. A. Pieczka, M. Stachowicz, S. Zelek-Pogud, B. Gołębiowska, M. Sek, K. Nejbert, J. Kotowski, B. Marciniak-Maliszewska, A. Szuskiewicz, E. Szeleg, K. M. Stadnicka, Krzysztof Woźniak, Scandian actinolite from Jordanów Śląski, Lower Silesia, Poland: Compositional evolution, crystal structure, and genetic implications, *American Mineralogist*, 109(1) (2024) 174-183, <https://doi.org/10.2138/am-2022-8786>, **IF = 2.7**
4. M. L. Chodkiewicz, L. Patrikeev, S. Pawłędzio, K. Woźniak, Transferable Hirshfeld atom model for rapid evaluation of aspherical atomic form factors, *IUCr*, 11(2) (2024) 249-259, <https://doi.org/10.1107/S205252524001507>, **IF = 2.9**
5. S. Pawłędzio, M. Ziemiński, M. Arhanagelski, D. Trzybiński, A. Makal, K. Woźniak, Influence of N-protonation on electronic properties of acridine derivatives by quantum crystallography, *RSC Advances*, 14 (2024) 5340-5350, DOI: 10.1039/d3ra08081a, **IF = 3.9**
6. K. Nowicki, J. Krajewska, T. Stepniński, M. Wielechowska, P. Wińska, A. Kaczmarek, J. Korpuska, J. Selent, P. H. Marek-Urban, K. Durka, K. Woźniak, A. E. Laudy, S. Luliński, Exploiting thiol-functionalized benzenosilaboroles for achieving diverse substitution patterns – synthesis, characterization and biological evaluation of promising antibacterial agents, *RSC Medicinal Chemistry*, 15 (2024) 1751-1772, <https://doi.org/10.1039/D4MD00061G>, **IF = 4.1**
7. A. Bodzioch, E. Objalska, R. Jakubowski, M. Celeda, A. Gardias, D. Trzybiński, P. Tokarz, J. Szczytko, K. Woźniak, P. Kaszyński, Electronic and Magnetic Interactions in 6-Oxoverdizyl Diradicals: Connection through N(1) or C(3) Revisited, *J. Org. Chem.*, 89(2024) 6306-6321, <https://doi.org/10.1021/acs.joc.4c00303>, **IF = 3.4**
8. A. Pieczka, M. Stachowicz, S. Zelek-Pogud, B. Gołębiowska, M. Sek, K. Nejbert, J. Kotowski, B. Marciniak-Maliszewska, A. Szuskiewicz, E. Szeleg, K. M. Stadnicka, Krzysztof Woźniak, Scandio-winchite, ideally (NaCa)(Mg<sub>4</sub>Se)(Si<sub>8</sub>O<sub>22</sub>)(OH)<sub>2</sub>: The first Sc-dominant amphibole-supergrup mineral from Jordanów Śląski, Lower Silesia, southwestern Poland, *American Mineralogist*, 109 (2024) 940-948, <https://doi.org/10.2138/am-2023-8974>, **IF = 2.7**
9. M. Wierzbicka, M. Begiedza, K. Bodzon, O. Bemowska-Kalabun, K. Brzost, M. Wróbel, D. Trzybiński, K. Woźniak, Role of the salt glands of *Armeria maritima* (halophyte) in removal of lead from tissues, *Environmental Science and Pollution Research*, 31 (2024) 37790-37809, <https://doi.org/10.1007/s11356-024-33624-z>
10. R. Gajda, J. Parafiniuk, P. Fertey, P. Dera, K. Woźniak, Electron density changes accompanying high-pressure phase transition in AIOOH, *Mineralogical Magazine*, 88(3) (2024) 288-301, <https://doi.org/10.1180/mgm.2024.22>, **IF = 2.8**
11. A. Kumar, K. K. Jha, B. Olech, T. Goral, M. Malinska, K. Woźniak, P. M. Dominiak, TAAM refinement on high-resolution experimental and simulated 3D ED/ MicroED data for organic molecules, *Acta Crystallographica*, C80(7) (2024) 264-277, <https://doi.org/10.1107/S205329624005357>, **IF = 0.7**
12. P. Pacholak, K. Durka, K. Woźniak, J. Krajewska, A. E. Laudy, S. Luliński, Ethynyl-substituted benzenosilaboroles: the role of C(π)-B interactions in their crystal packing and use in Cu(I)-catalyzed 1,3-dipolar cycloaddition, *RSC Advances* 14 (2024) 16069-16082, <https://doi.org/10.1039/D4RA02137A>, **IF = 3.9**
13. J. Skiba, M. Hirschfeld, H. Lang, D. Trzybiński, K. Woźniak, M. Gazecka, P. Zmora, K. Kowalski, Click-ferrocenyl nucleosides – synthesis, electrochemistry, and antiproliferative activity studies, *Journal of Organometallic Chemistry* 1016 (2024) 123242, <https://doi.org/10.1016/j.jorganchem.2024.123242>, **IF = 2.1**
14. M. L. Chodkiewicz, B. Gruza, K. K. Jha, P. M. Dominiak, K. Woźniak, Hirshfeld atom refinement and dynamical refinement of hexagonal ice structure from electron diffraction data, *IUCr*, 11(5) (2024) 730-736, <https://doi.org/10.1107/S2052525240068>, **IF = 2.9**
15. P. H. Marek-Urban, D. R. Natkowski, K. Wrochna, A. Zuba, G. Jedrzejczyk (Jedrzejczyk), A. Blacha-Grzechnik, M. Grzywa, K. Woźniak (Woźniak), K. Durka, Luminescence modulated by molecular conformation in stimuli-responsive polymorphs of dibenzothiaiborone dioxide-pyridylphenolate complex, *Dyes and Pigments*, 231 (2024) 112368, <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2024.112368>, **IF = 4.1**
16. D. Trzybiński, M. Ziemiński, B. Olech, S. Sutula, T. Goral, O. Bemowska-Kalabun, K. Brzost, M. Wierzbicka, K. Woźniak, MicroED: Unveiling the Structural Chemistry of Plant Biomaterialisation, *Molecules*, 29(20) (2024) 4916, <https://doi.org/10.3390/molecules29204916>, **IF = 4.2**
17. R. Gajda, S. Podsiadło, C. Jastrzębski, P. Dłuzewski, K. Woźniak, Sn<sub>3</sub>S<sub>4</sub> - A New Mixed Tin Sulphide, *CrystEngComm*, 26 (2024) 6553-6561, <https://doi.org/10.1039/D4CE00629A>, **IF = 2.6**
18. M. Sołtyka-Krajewska, M. Ziemiński, A. Zawadzka-Kazimierzczuk, P. Skrzypczyk, E. Siwiak-Niezbalska, A. Jaskiewicz, R. Zieliński, I. Fokt, S. Skóra, W. Kozmiski, K. Woźniak, W. Priebe, Beata Pajak-Tarnacka, Potent Biological Activity of Fluorinated Derivatives of 2-Deoxy-D-Glucose in a Glioblastoma Model, *Biomedicines*, 12(10) (2024) 2240, <https://doi.org/10.3390/biomedicines12102240>, **IF = 3.9**
19. A. Pieczka, B. Gołębiowska, A. Włodek, M. Stachowicz, P. Jokubauskas, J. Kotowski, K. Nejbert, A. Szuskiewicz, K. Woźniak, Allantite-(Sm), CaSm(Al<sub>2</sub>Fe<sub>2+</sub>)(Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>)(SiO<sub>4</sub>)O(H), the third samarium mineral from Jordanów Śląski, Lower Silesia, Poland, *American Mineralogist* (2024) <https://doi.org/10.2138/am-2024-9453>, **IF = 2.7**
20. R. Gajda, T. Poreba, J. Parafiniuk, M. Mezouar, K. Woźniak, Incommensurately modulated structure of Hemimorphite under pressure, *IUCr*, 12(1) (2025) 62-73 <https://doi.org/10.1107/S205252524011060>, **IF = 2.9**
21. M. Urban, K. Wrochna, P. H. Marek-Urban, D. R. Natkowski, K. Woźniak, P. Pander, A. P. Monkman, K. Durka, S. Luliński, Strongly fluorescent spiro-type tetracoordinate complexes of dibenz[*b*,*e*]1,4-thiaiborone dioxide with functionalized 2-(benzo[d]heterazol-2-yl)phenolate ligands displaying TADF, *Journal of Materials Chemistry C* 13 (2024) 146-159, <https://doi.org/10.1039/D4TC03450C>, **IF = 5.7**
22. K. Woźniak, Quantum Crystallographic Studies of Phase Transition in Minerals under Pressure, *Acta Crystallographica A-Foundation and Advances*, Volume: 80, Supplement: 5, (2024), DOI:10.1107/S20532733240096025, **IF = 1.9**
23. S. Olusegun, G. Souza, S. Sutula, M. Osiat, M. Krajewski, M. Pełka, K. Sobczak, E. Felis, P. Krysiński, Methotrexate anti-cancer drug removal using Gd-doped Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>: Adsorption mechanism, thermal desorption and reusability, *Groundwater for Sustainable Development*, 2024, 25, 101103, <https://doi.org/10.1016/j.gsd.2024.101103>, **IF = 4.90**

**Łącznie 23 publikacje o sumarycznym IF = 70.7!**

**Wybrane najciekawsze artykuły**

The grid contains 12 thumbnails of research papers. The papers include:

- IUCr**: Enhancing hydrogen positions in X-ray structures of transition metal hydride complexes with dynamic quantum crystallography.
- IUCr**: Transferable Hirshfeld atom model for rapid evaluation of aspherical atomic form factors.
- IUCr**: Hirshfeld atom refinement and dynamical refinement of hexagonal ice structure from electron diffraction data.
- RSC Advances**: Influence of N-protonation on electronic properties of acridine derivatives by quantum crystallography.
- RSC Medicinal Chemistry**: Exploiting thiol-functionalized benzenosilaboroles for achieving diverse substitution patterns – synthesis, characterization and biological evaluation of promising antibacterial agents.
- CrystEngComm**: Sn<sub>3</sub>S<sub>4</sub> a new mixed-valence tin sulfide.
- RSC Advances**: Influence of N-protonation on electronic properties of acridine derivatives by quantum crystallography.
- RSC Medicinal Chemistry**: Exploiting thiol-functionalized benzenosilaboroles for achieving diverse substitution patterns – synthesis, characterization and biological evaluation of promising antibacterial agents.

**Z życia Grupy...**

The grid shows six photos of group activities:

- Spotkanie grupowe w restauracji Jeff's.** A group of people sitting around a table in a restaurant.
- Na pomiarach neutronowych w Oak Ridge (USA).** Two people standing in front of a large scientific facility.
- Dr Szymon Sutula raczy się pizzą.** A man holding a large pizza.
- Dr Marcin Zamiatka - Radca Zimowy Festiwal Biegowy, górski maraton przez Rudawy Janowickie.** A man in winter gear standing in a snowy landscape.
- Wizyta na Uniwersytecie w Wiedniu - Roland Giester oprowadzający nas po uniwersyteckim muzeum mineralogicznym.** A man in a blue shirt showing a museum display.
- Na konferencji gordnowskiej w Holderness.** A man standing on a grassy field.