

Zgłoszenie tematu badawczego realizowanego w Krakowskiej Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej w dziedzinie *nauki ścisłe i przyrodnicze, dyscyplina nauki fizyczne*

1	Nazwisko i imię promotora, tytuł/stopień naukowy, jednostka, adres e-mail	Kwiatek, Wojciech M., prof. dr hab. Instytut Fizyki Jądrowej PAN wojciech.kwiatek@ifj.edu.pl
2	Nazwisko i imię promotora pomocniczego (opcjonalnie), jednostka, adres e-mail	Nowakowski Michał Faculty of science University of Paderborn michal.nowakowski@upb.de
3	Temat pracy badawczej + krótki (do 250 słów) opis tematyki badawczej	<p><i>„Badania struktury elektronowej kompleksów nanocząstek metali i tlenków metali z peptydami amyloidu beta (w obecności i bez ludzkiego białka S100B) lub ludzkiej cystatyny C przy użyciu spektroskopii absorpcji promieniowania rentgenowskiego”.</i></p> <p>Do badań struktury elektronowej kompleksów nanocząstek metali z peptydami amyloidu beta wykorzystane zostanie promieniowanie synchrotronowe w metodzie XAS (X-ray Absorption Spectroscopy). XAS składa się z dwóch odrębnych technik spektroskopowych: spektroskopii X-ray Absorption Near-Edge (XANES) - w której widma rejestrowane są typowo w zakresie 30-50 eV wokół głównej krawędzi absorpcji, oraz rozszerzonej spektroskopii X-ray Absorption Fine-Structure (EXAFS) - w której widma rejestrowane są do ok. 1000 eV powyżej krawędzi absorpcji, pozwala na określenie lokalnej struktury koordynacyjnej badanego kompleksu. Pozwala też na określenie stanu utlenienia i spinowego badanego atomu centralnego, liczby i rodzaju atomów otaczających wybrany pierwiastek (atom centralny).</p> <p>Podczas gdy w XAS sonduje się stany niezajęte, w spektroskopii emisji promieniowania X (X-ray Emission Spectroscopy - XES) bada się stany zajęte. Dzięki temu w XES uzyskuje się komplementarną informację o zajętych stanach badanego pierwiastka, dostarczając danych o stanie spinowym, stanie utlenienia i warunkach wiązania. W przeciwieństwie do EXAFS, XES może również jednoznacznie odróżnić rodzaj pierwiastków lekkich związanych z badanym metalem.</p> <p>Widma XAS i XES będą redukowane i analizowane przy użyciu pakietu Demeter oraz samodzielnie napisanych skryptów Pythona. Analiza zostanie uzupełniona o obliczenia ab-initio w oprogramowaniu FEFF</p>

		9.6, FDMNES oraz obliczenia TD-DFT w oprogramowaniu Orca. Uzyskane wyniki analiz w odniesieniu do wybranych referencji (np. dla kompleksów Cu ²⁺ będą stanowiły benchmarking lokalnego środowiska koordynacyjnego wokół jonów Cu ²⁺ i Zn ²⁺ w naszych kompleksach białkowych pod względem struktury elektronowej i lokalnej geometrii.
4	Wymagania w stosunku do kandydata	Ukończone studia magisterskie w zakresie fizyki lub nauk pokrewnych: chemia, biofizyka, biochemia; Znajomość języka angielskiego; Mile widziana znajomość języka Python.
5	Wskazanie źródeł finansowania	Grant pt.: „ <i>Molekularne podstawy powstawania chorób neurodegeneracyjnych – wpływ wybranych nanocząstek metalicznych</i> ”, umowa nr UMO-2021/41/B/ST4/03807, stanowisko kosztów: G53612 realizowanego w IFJ PAN

1	Supervisor: name/surname, degree, affiliation, e-mail address	Kwiatek, Wojciech M., prof. dr hab. Instytut Fizyki Jądrowej PAN wojciech.kwiatek@ifj.edu.pl
2	Auxiliary supervisor (optional) affiliation, e-mail address	Nowakowski Michał Faculty of science University of Paderborn michal.nowakowski@upb.de
3	Research subject Title Short description, up to 250 words	“ <i>Studies of the electronic structure of aggregates between metal nanoparticles and metal oxide nanoparticles, amyloid beta peptides (with and without the presence of human S100B protein) or human cystatin C using X-ray absorption spectroscopy (XAS)</i> ”. X-ray Absorption Spectroscopy (XAS) synchrotron radiation will be used to study the electron structure of metal nanoparticle complexes with amyloid beta peptides. XAS consists of two distinct spectroscopic techniques: X-ray Absorption Near-Edge Spectroscopy (XANES) - in which spectra are typically recorded in the range of 30-50 eV around the main absorption edge and Extended X-ray Absorption Fine-Structure Spectroscopy (EXAFS) - in which spectra are recorded up to about 1000 eV

		<p>above the absorption edge, allows determination of the local coordination structure of the complex under study. It also allows the determination of the oxidation and spin state of the central atom under study, the number, and the type of atoms surrounding the selected element (central atom).</p> <p>While unoccupied states are probed in XAS, occupied states are studied in X-ray Emission Spectroscopy (XES). Thus, in XES, complementary information on the occupied states of the element under study is obtained, providing data on the spin state, oxidation state, and bonding conditions. Unlike EXAFS, XES can also unambiguously distinguish the type of light elements bound to the metal under study.</p> <p>XAS and XES spectra will be reduced and analyzed using the Demeter package and self-written Python scripts. The analysis will be supplemented with ab-initio calculations in FEFF 9.6 software, FDMNES, and TD-DFT calculations in Orca software. The obtained analysis results for selected references (e.g., for Cu²⁺ complexes will benchmark the local coordination environment around Cu²⁺ and Zn²⁺ ions in our protein complexes in terms of electron structure and local geometry.</p>
4	Additional requirements for the candidate	<p>Completed Master's degree in Physics or Related Sciences: Chemistry, Biophysics, Biochemistry;</p> <p>Knowledge of English;</p> <p>Knowledge of Python language is welcome.</p>
5	Sources of financing	<p>The grant entitled: <i>"Molecular basis of neurodegenerative diseases – the impact of selected metallic nanoparticles"</i>, contract no. UMO-2021/41/B/ST4/03807, cost stand: G53612 implemented at IFJ PAN</p>