UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

Panel

Synteza Chemiczna

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

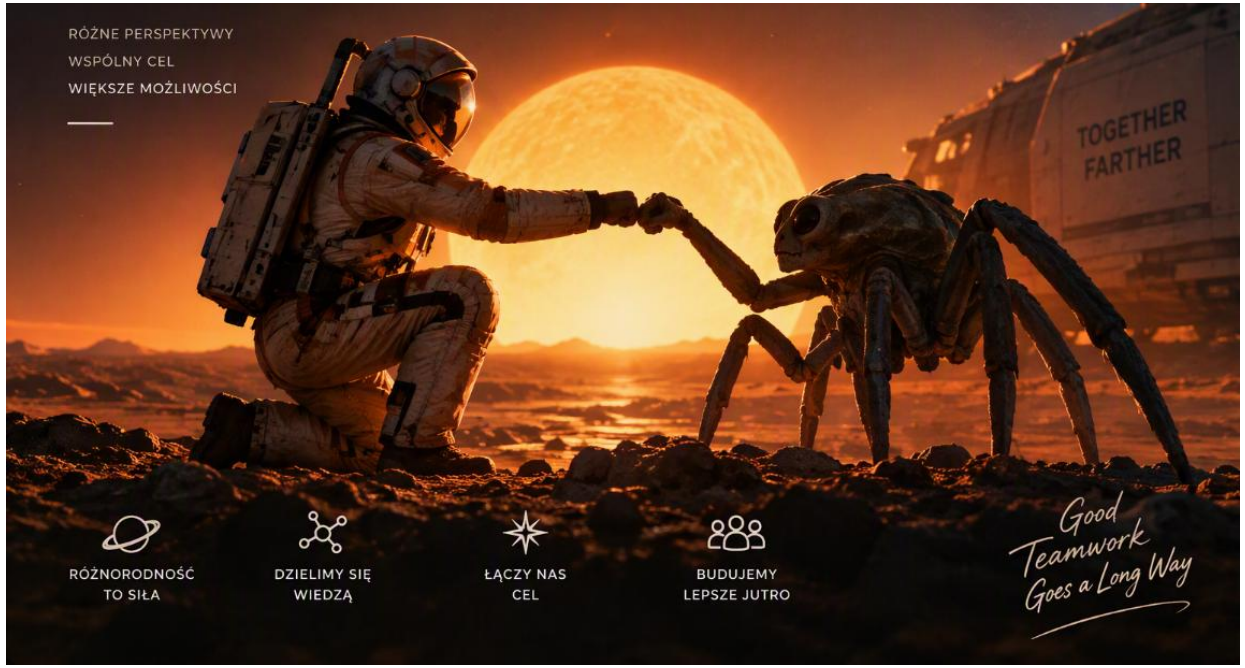
Koordynatorzy:
prof. dr hab. Robert Podgajny, robert.podgajny@uj.edu.pl, **C2-03, wew. 2459**
prof. dr hab. Miłosz Pawlicki, milosz.pawlicki@uj.edu.pl, **D2-28, wew. 2452**

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

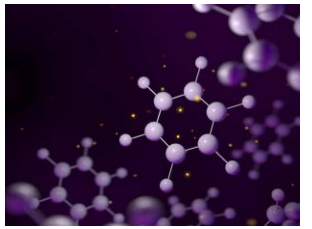
Panel
Synteza Chemiczna

Sami możemy przeżyć.
Razem możemy dotrzeć dalej.

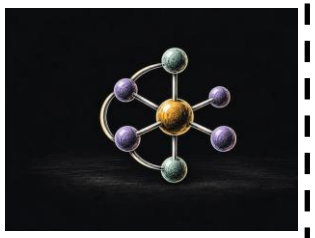
Project Hail Mary

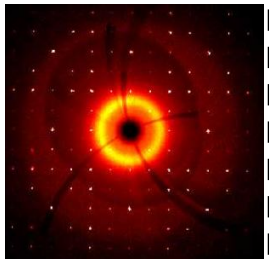


Zakład Chemii Organicznej



Zakład Chemii Nieorganicznej





Zakład Krystalochemii i Krystalofizyki



Zakład Chemii Teoretycznej

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

Synteza Chemiczna

OD CZĄSTECZEK DO MATERIAŁÓW FUNKCJONALNYCH

PRECYZYJNY PROCES – OD PROJEKTU DO ZASTOSOWAŃ.



1. Projektowanie
Tworzenie cząsteczek o pożądanych właściwościach metodami obliczeniowymi i eksperymentalnymi.

2. Samoorganizacja
Precyzyjne uporządkowanie pojedynczych cząsteczek.

3. Integracja
Włączanie materiałów do urządzeń i systemów.

4. Funkcjonowanie
Realizacja użytecznych funkcji w rzeczywistych zastosowaniach technologicznych.

UNIKALNE WŁAŚCIWOŚCI

WYJĄTKOWA FUNKCJONALNOŚĆ NA POZIOMIE POJEDYNCZYCH CZĄSTECZEK



Elektroniczne
Umożliwiają transport ładunku na poziomie pojedynczych cząsteczek.

Optyczne
Wyjątkowe właściwości absorpcji i emisji światła.

Mechaniczne
Niezwykła wytrzymałość i elastyczność w nanoskali.

Chemiczne
Wysoka selektywność i czułość na otoczenie.

Strojalne
Właściwości mogą być precyzyjnie projektowane poprzez odpowiednią budowę cząsteczki.

PRAKTYCZNE ZASTOSOWANIA

JEDNOCZĄSTECZKOWE MATERIAŁY. REALNE ROZWIĄZANIA.



Elektronika nowej generacji
Mniejsze, szybsze i bardziej energooszczędne układy.

Czujniki
Wykrywanie gazów, substancji chemicznych i biomolekuł z bardzo wysoką czułością.

Czysta energia
Wydajniejsze ogniwa słoneczne, baterie i katalizatory.

Technologie medyczne
Ukierunkowane dostarczanie leków i diagnostyka molekularna.

Zrównoważony rozwój
Bardziej ekologiczne procesy produkcyjne i remediacja środowiska.

Zakład Chemii Organicznej

Zakład Chemii Nieorganicznej

Zakład Krystalochemii i Krystalofizyki

Zakład Chemii Teoretycznej

Panel
Synteza Chemiczna

Sami możemy przeżyć.
Razem możemy dotrzeć dalej.
Project Hail Mary



Synteza organiczna i nieorganiczna (koordynacyjna):
- techniki laboratoryjne (syntetyczne)
- praca w atmosferze obojętnej - linia Schlenka, komory rękawicowe
- mechanochemia, hydrotermalne
- techniki analityczne, spektroskopowe - ***hands-on***



Techniki oczyszczania:
- HPLC, również w wariancie chiralnym
- aparatura Flash,





Techniki analityczne:
- magnetyczny rezonans jądrowy,
- absorpcja i emisja, również w wariancie chiralnym (CD, CPL)
- rentgenografia strukturalna – scXRD i pXRD,
- pomiary magnetyczne (EPR, SQUID)



Analiza teoretyczna:
- optymalizacja geometrii na podstawie np. danych scXRD,
- post-optymalizacyjna analiza właściwości spektroskopowych,
- optymalizacja stanów przejściowych,
- krystalografia kwantowa

Zakład Chemii Organicznej

Zakład Chemii Nieorganicznej

Zakład Krystalochemii i Krystalofizyki

Zakład Chemii Teoretycznej

Panel
Synteza Chemiczna

Sami możemy przeżyć.
Razem możemy dotrzeć dalej.
Project Hail Mary

Synteza organiczna i nieorganiczna (koordynacyjna):
- techniki laboratoryjne (syntetyczne)
- praca w atmosferze obojętnej - linia Schlenka, komory rękawicowe
- mechanochemia, hydrotermalne
- techniki analityczne, spektroskopowe - ***hands-on***

Techniki oczyszczania:
- HPLC, również w wariancie chiralnym
- aparatura Flash,

Techniki analityczne:
- magnetyczny rezonans jądrowy,
- absorpcja i emisja, również w wariancie chiralnym (CD, CPL)
- rentgenografia strukturalna – scXRD i pXRD,
- pomiary magnetyczne (EPR, SQUID)

Analiza teoretyczna:
- optymalizacja geometrii na podstawie np. danych scXRD,
- post-optymalizacyjna analiza właściwości spektroskopowych,
- optymalizacja stanów przejściowych,
- krystalografia kwantowa

Zajęcia główne

Strategie syntezy materiałów molekularnych (75h)
wykład główny, prof. R. Podgajny, dr S. Baś

Analiza retrosyntetyczna i mechanizmy reakcji w chemii organicznej (30h)
wykład, dr Ł. Woźniak

Pracownia specjalizacyjna (120h)
zajęcia praktyczne, prof. D. Pinkowicz, dr S. Baś

Rentgenowska analiza strukturalna materiałów molekularnych (15h)
warsztaty, prof. M. Gryl, dr M. Kozieł

Modelowanie kwantowo-chemiczne materiałów molekularnych (15h)
warsztaty, prof. M. Srebro-Hooper

Efekty optyczne i elektryczne w materiałach molekularnych (15h+15h)
wykład, konwersatorium, prof. S. Chorąży

Organiczne materiały funkcjonalne (15h)
wykład, prof. M. Pawlicki

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

Panel
Synteza Chemiczna

Sami możemy przeżyć.
Razem możemy dotrzeć dalej.
Project Hail Mary

Sugerowane kursy do wyboru

Fizyczna Chemia Organiczna z Elementami Fizykochemii Materiałów Chiralnych (30h)
wykład, prof. Miłosz Pawlicki, dr Krzysztof Dzieszkowski

Lanthanide and actinide materials for photonic applications (30h)
wykład (15h) / konwersatorium (15h), dr hab. Szymon Chorąży, prof. UJ

Quantum Coordination Chemistry (30h)
warsztaty z elementami wykładowymi, dr hab. Mariusz Radoń, prof. UJ

Enabling Technologies in Organic Synthesis (15h)
wykład, Dr Łukasz Woźniak

Metal-organic frameworks: advanced multifunctional materials (30h)
wykład, prof. Dariusz Matoga

Frontiers in Crystal Engineering (30h)
wykład (15h) / seminarium (15h), dr hab. Marlena Gryl, prof. UJ

Molecular Magnetism (30h)
wykład, prof. Robert Podgajny

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

Optical and Spectroscopic Devices for Chemical Sensing (30h)
wykład (22h) /warsztaty (8h), prof. Kamilla Małek

Projektowanie i druk 3D (15h)
warszat, prof. Marcin Molenda

Transition metal catalysis in organic synthesis (15h)
wykład (15h) Prof. Małgorzata Brindell / prof. Isabelle Gillaizeau

Zajęcia główne

Strategie syntezy materiałów molekularnych (75h)
wykład główny, prof. R. Podgajny, dr S. Baś

Analiza retrosyntetyczna i mechanizmy reakcji w chemii organicznej (30h)
wykład, dr Ł. Woźniak

Pracownia specjalizacyjna (120h)
zajęcia praktyczne, prof. D. Pinkowicz, dr S. Baś

Rentgenowska analiza strukturalna materiałów molekularnych (15h)
warsztaty, prof. M. Gryl, dr M. Kozieł

Modelowanie kwantowo-chemiczne materiałów molekularnych (15h)
warsztaty, prof. M. Srebro-Hooper

Efekty optyczne i elektryczne w materiałach molekularnych (15h+15h)
wykład, konwersatorium, prof. S. Chorąży

Organiczne materiały funkcjonalne (15h)
wykład, prof. M. Pawlicki

Ścieżki kariery

Naukowa



Wydział Chemii UJ
oraz
współpracujące
ośrodki naukowe





Projekty badawcze
krajowe i międzynarodowe

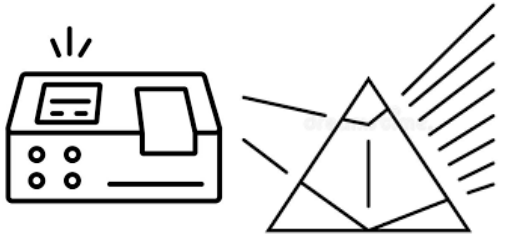
Poza uniwersytetem



Grupa Azoty



Selwita



Rigaku, Shimadzu

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

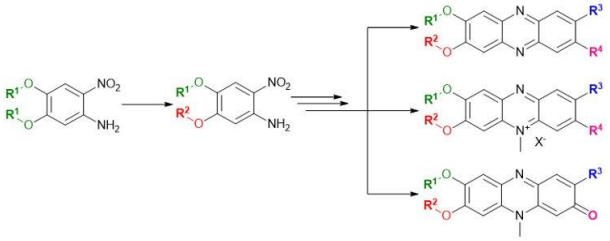
Prezentacja grup badawczych

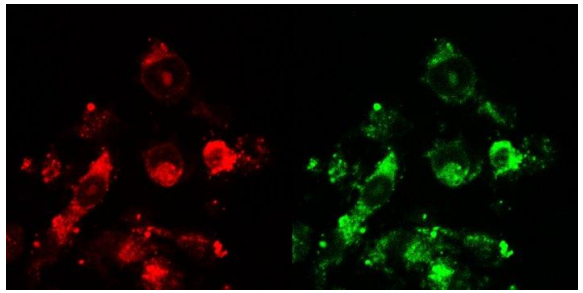
Zespół Fizykochemii Organicznej

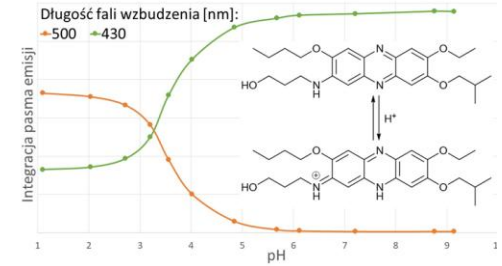
Kierownik Zespołu: dr hab. Katarzyna Ostrowska

email: k.ostrowska@uj.edu.pl

Synteza i badanie fluorescencyjnych i cytotoksycznych pochodnych fenazyny



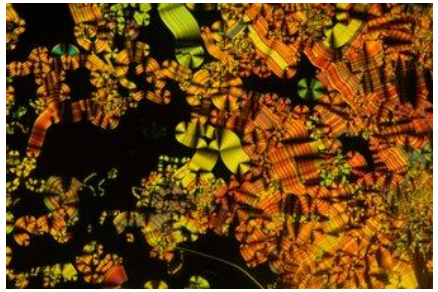


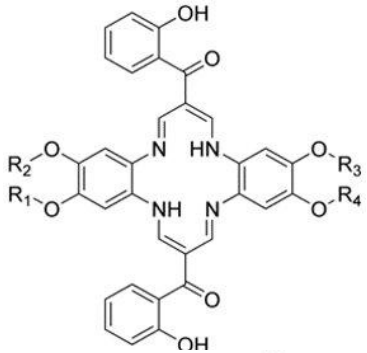


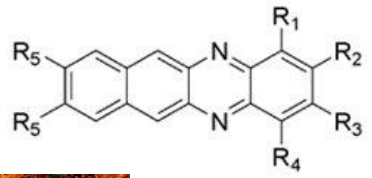


Synteza i charakteryzacja nowych związków ciekłokrystalicznych

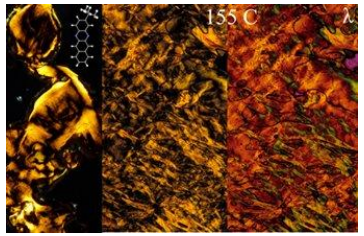
Nowe materiały do zastosowań w elektronice organicznej



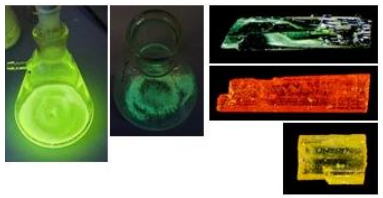


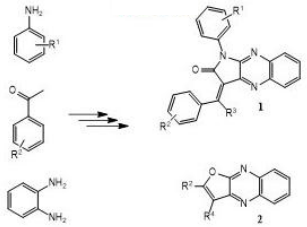


Badania elektro-optyczne i dielektryczne

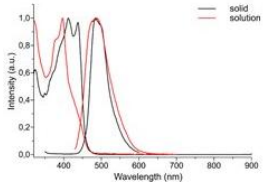


Synteza pirolo- i furanochinoksalin oraz ich kompleksów





Pomiary fluorescencji w roztworze i ciele stałym



Obliczenia widm UV-Vis i fluorescencyjnych.



Grupa Metaloorganicznych Materiałów Molekularnych

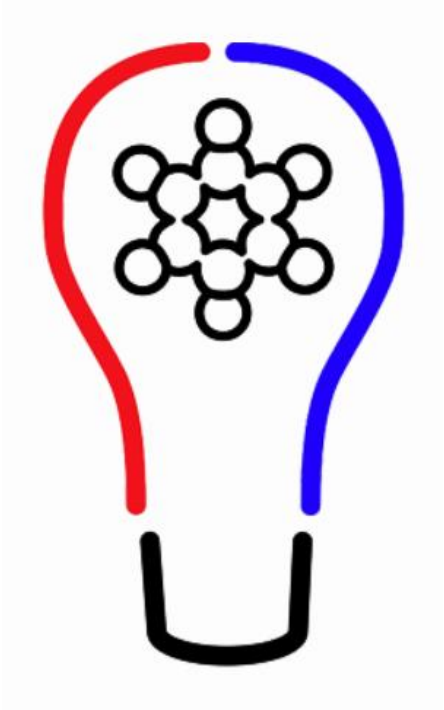
@Orgmetallics

organometallic molecular materials group

erc

https://photomagnet.chemia.uj.edu.pl/en_GB/start

PI: dr hab. Dawid Pinkowicz, prof. UJ; członkowie: Dr J. Yadav, Dr P. Pakulski, M. Zakrocka, W. Wolański, A. Kałuża, B. Grzywa, I. Nowak P. Niedobecki

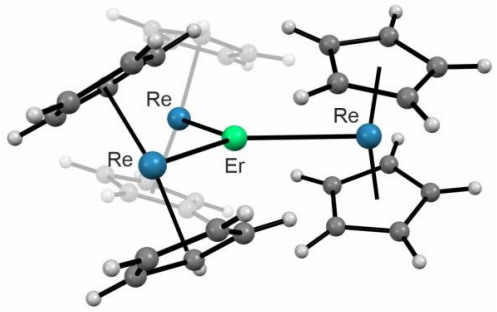


Granty badawcze ERC i NCN

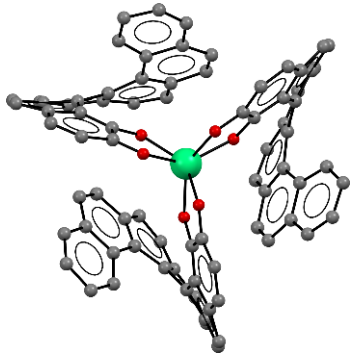
Projektowanie i synteza magnetycznych związków

metaloorganicznych, koordynacyjnych i organicznych (komora rękawicowa, linia Schlenka)

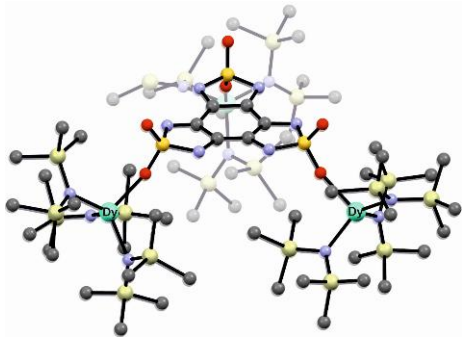
Magnesy metaloorganiczne



Magnesy chiralne



Magnesy organiczne



Badania struktury: dyfrakcja rentgenowska i spektroskopia NMR

dostęp do aparatury:
- Dyfraktometry monokrystaliczny i proszkowy
- Spektrometry NMR i IR

Badania właściwości magnetycznych, optycznych i elektrochemicznych

dostęp do aparatury:
- Magnetometr SQUID, kriostaty optyczne
- Spektrometry CD, MCD i MChD

Granty badawcze ERC i NCN. Wybrane publikacje:

Single-molecule toroics with a chiral twist (M. Zakrocka, D. Pinkowicz *Nat. Chem.* **2026**, *18*, 979);
Reversible single crystal photochemistry and spin state switching in a metal-cyanide complex (M. Maggot et al. *Nat. Commun.* **2025**, *16*, 8377);
A multifunctional pseudo-[6]oxocarbon molecule innate to six accessible oxidation states (P. Pakulski et al. *Chem* **2024**, *10*, 971).

Zespół Funkcjonalnych Materiałów Organicznych

Kierownik Zespołu: prof. dr hab. Miłosz Pawlicki

email: milosz.pawlicki@uj.edu.pl

www: http://mjplab.org/

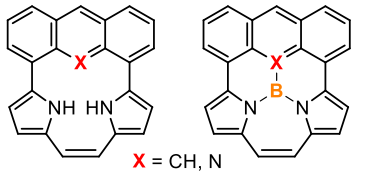
Organic Functional Materials

Finansowanie w ramach projektów NCN, NAWA, IDUB

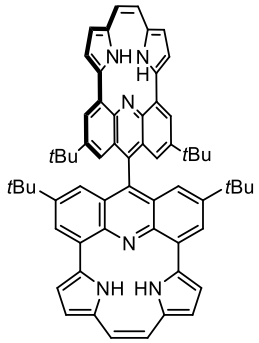
Właściwości optyczne
Aromatyczność - Antyaromatyczność
Fluorescencja

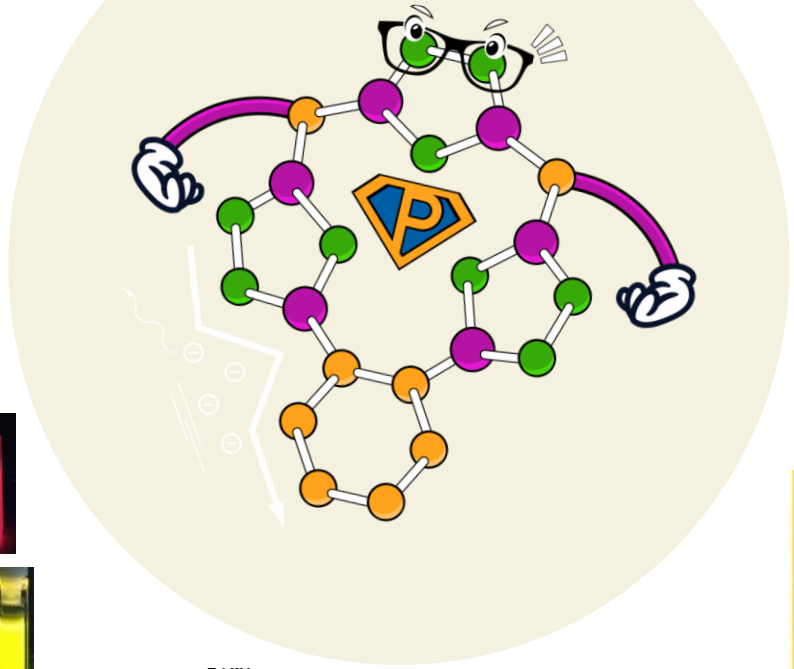
Spektroskopia (NMR, EPR, UV-Vis etc.)
Rentgenografia strukturalna
Analiza teoretyczna (DFT)

Optymalizacja i synteza chromoforów i fluoroforów

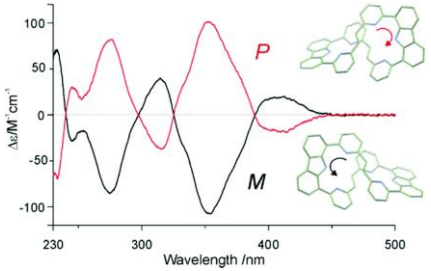


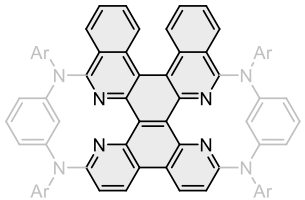
Radical character (anion vs. neutral)



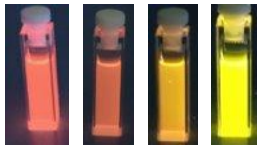


Chiralność pochodnych o rozszerzonej delokalizacji

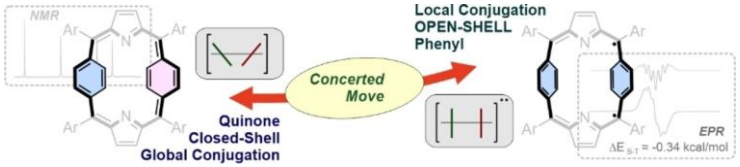


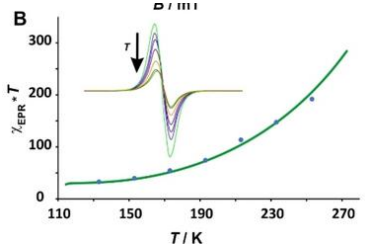


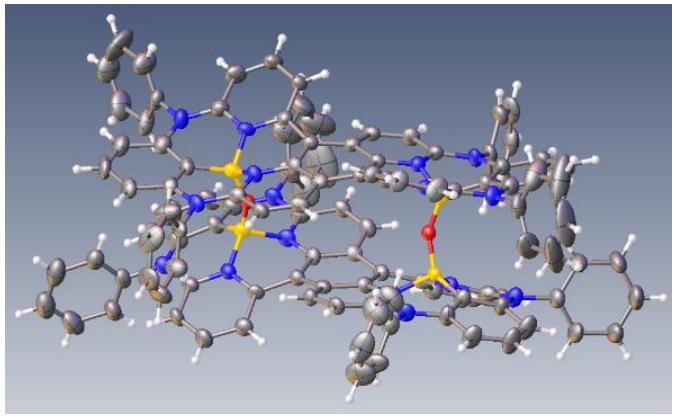


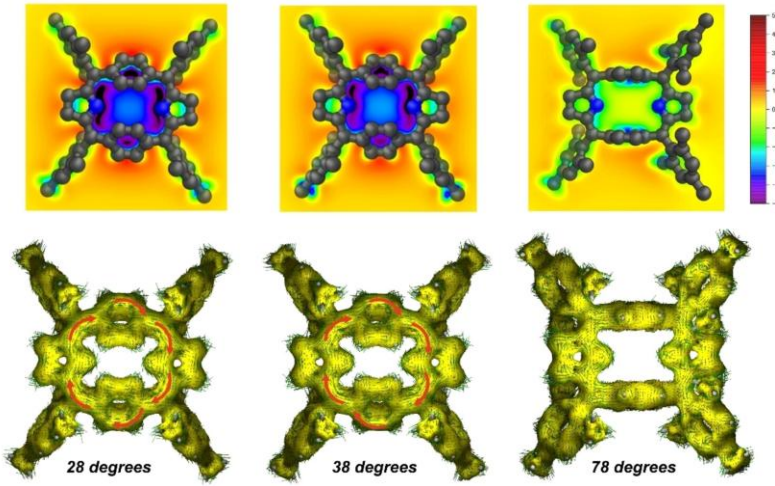


Stabilizacja trwałych (di)rodników organicznych









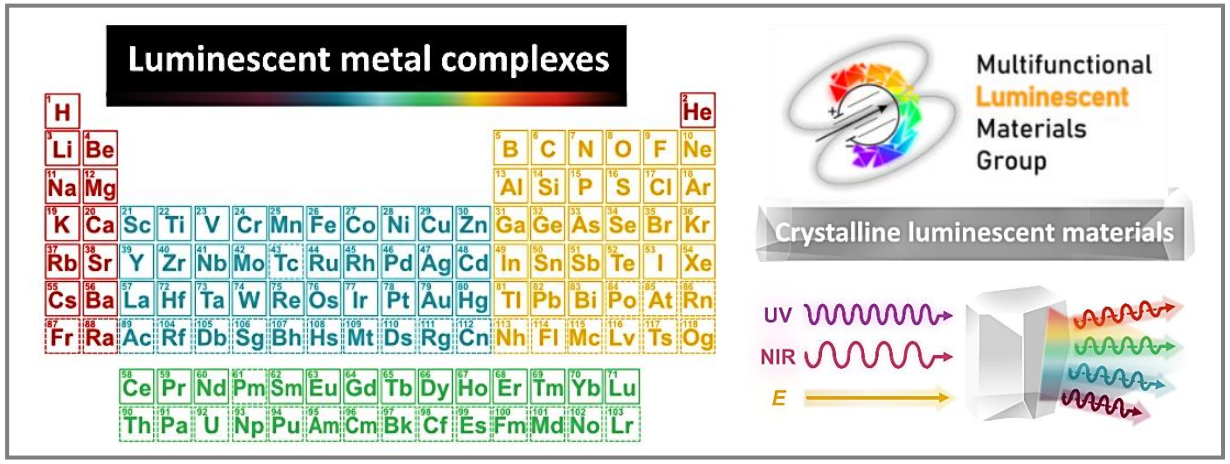
Wybrane publikacje: *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, *63*, e202400780;
Chem. Commun. **2025**, *61*, 9424-9427, *Chem. Commun.* **2026**, *62,* 2976-2980; *Chem. Sci.* **2026**, early view;

Grupa Wielofunkcyjnych Materiałów Luminescencyjnych

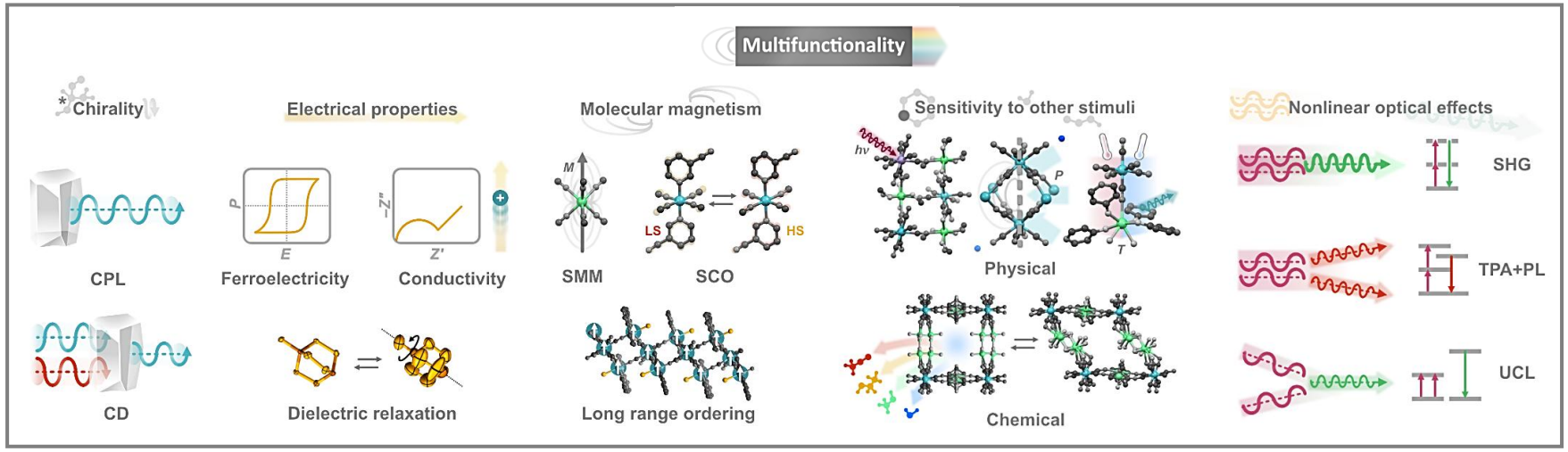
(Multifunctional Luminescent Materials Group, MLMG)

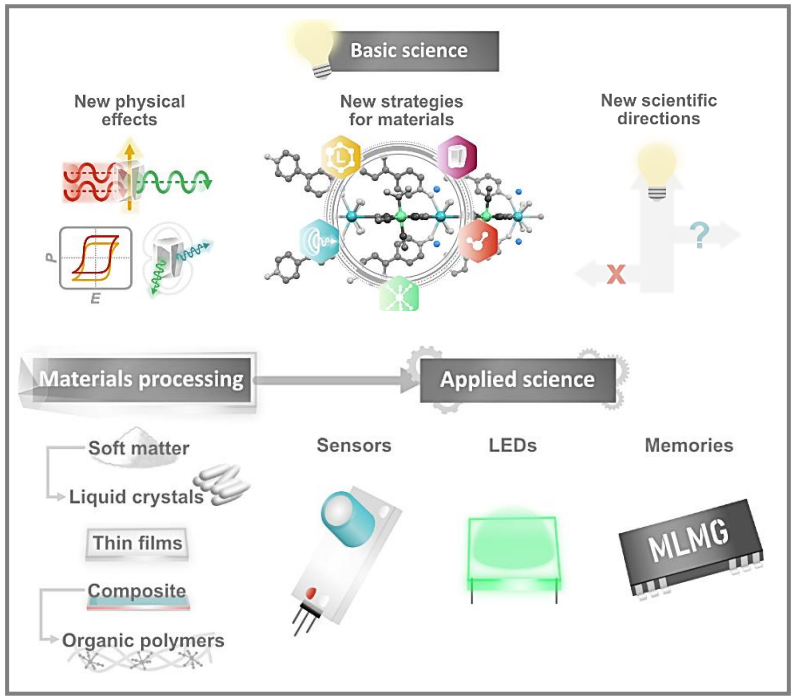
Head: dr hab. Szymon Chorąży, prof. UJ

multilumimater.pl





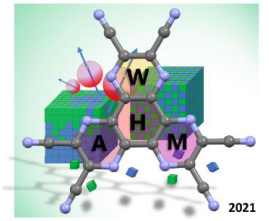




Granty badawcze ERC i NCN. Trzy wybrane ostatnie osiągnięcia naukowe: ferroelektryczny termometr luminescencyjny (P. Bonarek et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, *65*, e9159585), luminescencyjny termo-higrometr (A. Hoffman et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2026**, *65*, e4451248), fotoluminescencyjny fotomagnes (J. J. Zakrzewski et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, *64*, e202424651).

Wieloskładnikowe Hierarchiczne Architektury Molekularne (WHAM)

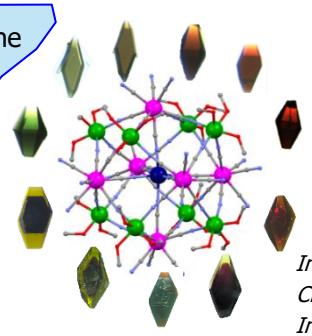
C2-03, E2-20
https://znmm.chemia.uj.edu.pl/wham_badania
robert.podgajny@uj.edu.pl

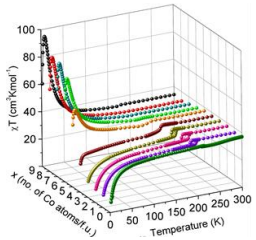


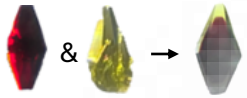
Zajmujemy się **tektoniką molekularną** czyli projektowaniem specyficznego uporządkowania cząsteczek w kryształach, dedykowanym przełączalnym materiałom magnetycznym i optycznym, w oparciu o rozpoznanie powtarzalności i hierarchiczności niekowalencyjnych oddziaływań międzycząsteczkowych

- ❑ Wielordzeniowe klastry i sieci koordynacyjne
- ❑ Bloki budulcowe drugiej generacji
- ❑ Hierarchiczność struktury i jej przemian
- ❑ Blokowe syntony supramolekularne

Przełączalne układy spinowe







Inorg. Chem. Front. **2026**, 13, 540
Cryst Growth Des. **2022**, *22*, 3413
Inorg Chem. **2021**, *60*, 10186
J. Am. Chem. Soc. **2016**, *138*, 1635

Inorg. Chem. **2023**, *62*, 7032



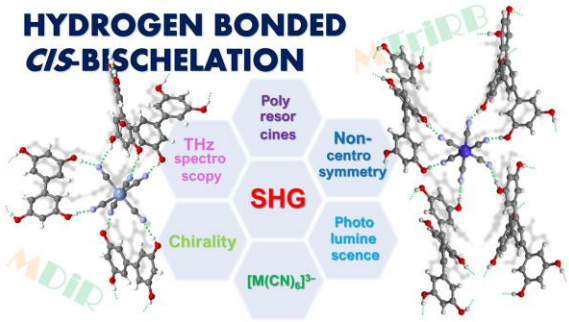
prof. dr hab. Robert Podgajny (PI)



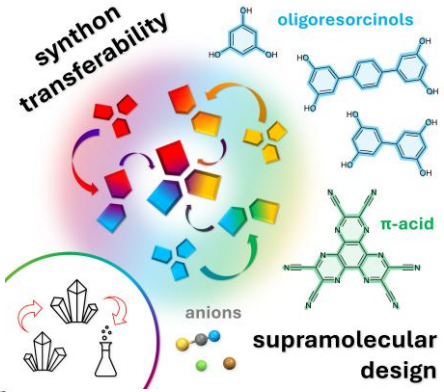
mgr Dorota Głosz

Kryształy fotoluminescencyjne, Właściwości optyki nieliniowej

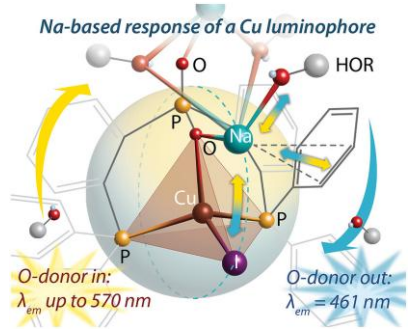
- ❑ (Nie)typowe oddziaływania niekowalencyjne
- ❑ Wielopozycyjne wiązanie anionów
- ❑ Chiralne syntony supramolekularne
- ❑ Powtarzalność i transferowalność syntonów
- ❑ Sole kokrystaliczne



Inorg. Chem. **2024**, *63*, 1803

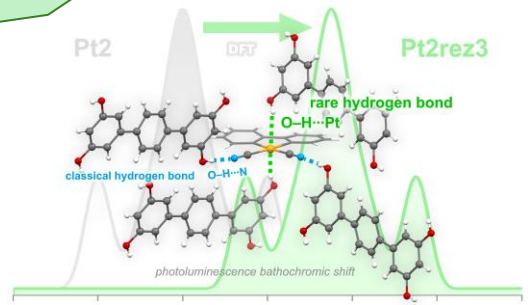


Chem. Eur. J. **2026**, e71501

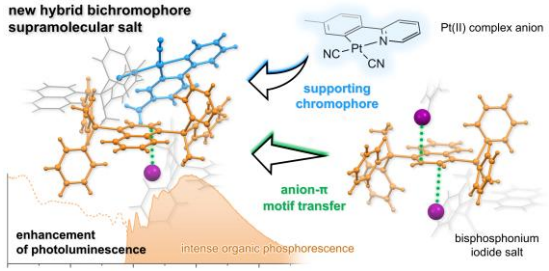


Angew. Chem Int. Ed. **2026**, anie.6117838

Coord. Chem. Rev. **2026**, 556, 217616



Chem. Eur. J. **2024**, *30*, e202400797



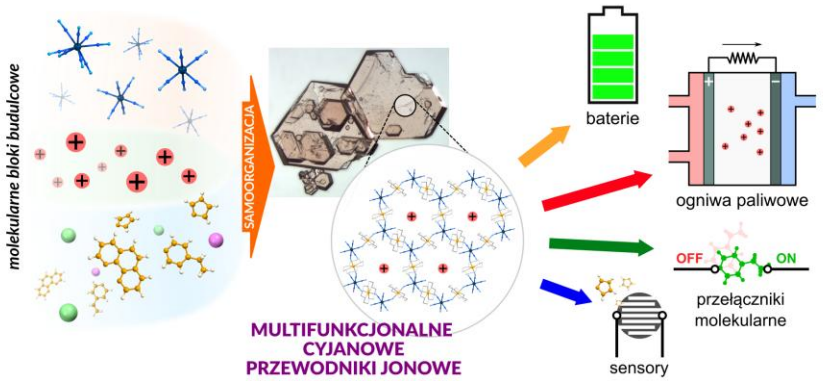
Dalton Trans. **2026**, *55*, 7142

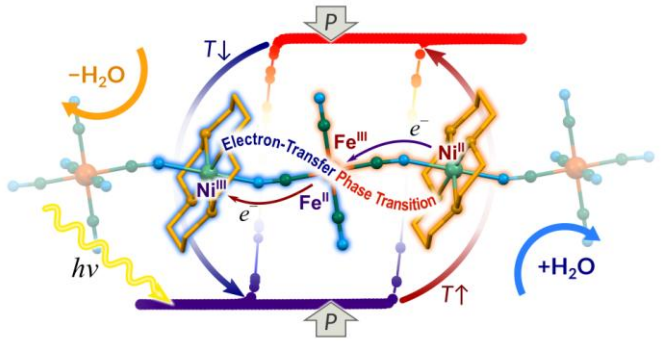
- ❑ **Układy o charakterze kombinatorycznym**
- ❑ **Uniwersalne węzły dla funkcjonalnych sieci molekularnych**

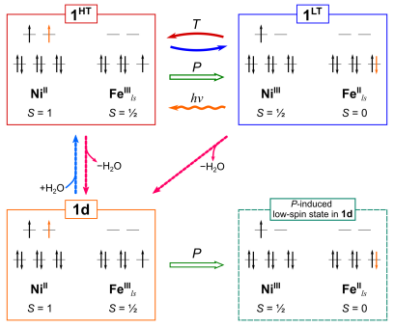
Inne tematy badawcze realizowane w Zespole

Przewodniki jonowe i multiresponsywne przełączniki molekularne (dr Mateusz Reczyński)

Multifunkcjonalne połączenia koordynacyjne z mostkami cyjanowymi wykazujące **przewodnictwo jonowe** oraz połączenia wykazujące przemiany fazowe (przejścia *charge transfer*) sterowane czynnikami chemicznymi i fizycznymi.



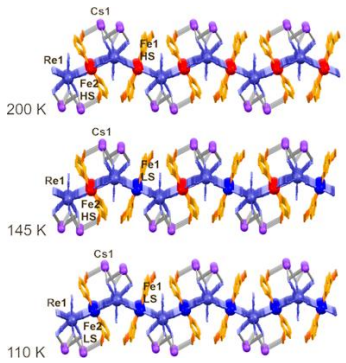


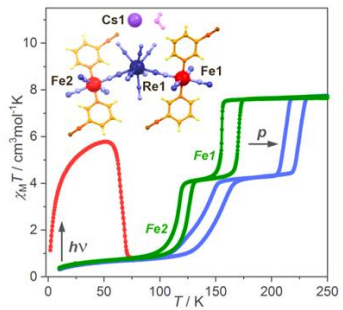


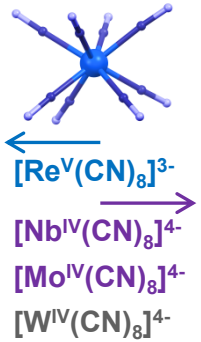
Reprezentatywne publikacje: *Inorg. Chem. Front.*, **2026**, *13,* 1118-1129. Inorg. Chem., 2025, 64, 7397 *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 2330; *Inorg. Chem*. **2019**, 58, 15812.

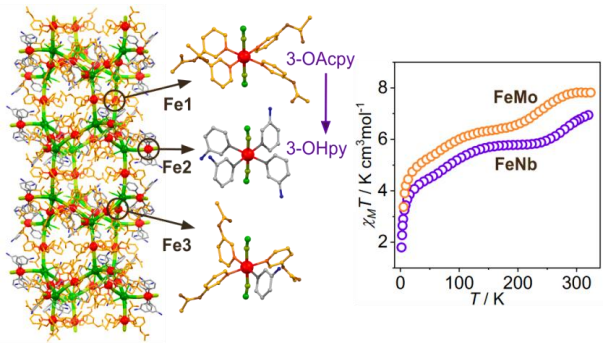
Przejścia spinowe w policyjanowych materiałach molekularnych (prof. dr hab. Barbara Sieklucka)

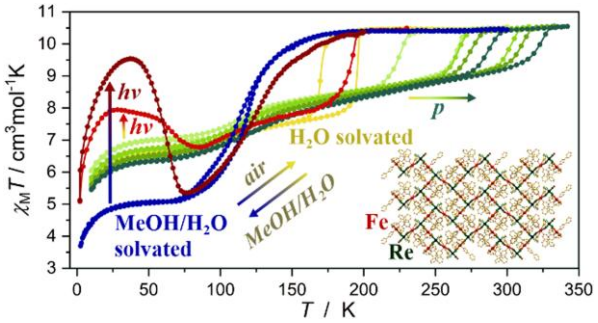
Materiały z przejściami spinowymi jako źródło termo- i piezo-chromizmu wykorzystujących efekty liniowe, nieliniowe i chiro-optyczne", (projekt NCN Opus-28).











Reprezentatywne publikacje: *J. Mater. Chem. C*, **2025**, *13*, 6745, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2025**, *64*, e20241924. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 15741; *Chem. Eur. J.* **2020**, *26*, 11187; *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 5872; *Inorg. Chem.*, **2019**, *58*, 6052

Zespół Nieorganicznych Materiałów Molekularnych

Aparatura:



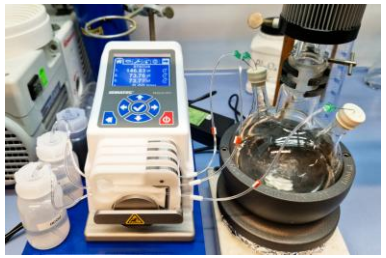
Systemy rękawicowe
do syntez w warunkach
beztlenowych/bezwodnych



Młyn kulowy
Fritsch Pulverisette 7



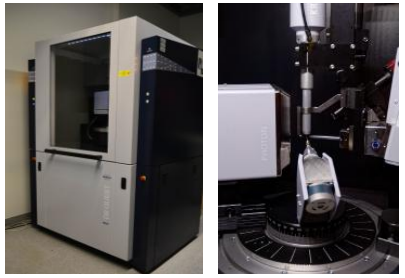
Syntezator mikrofalowy
MARS (CEM)



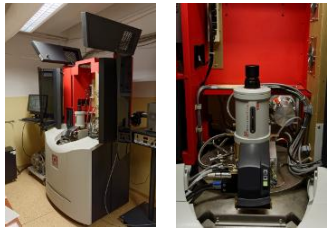
pompa perystaltyczna
Ismatec MasterFlex MFLX78001



Powlekacz obrotowy
(Spin coater) Ossila



monokrystaliczny
dyfraktometr rentgenowski



magnetometr SQUID do pomiarów
magnetycznych i fotomagnetycznych



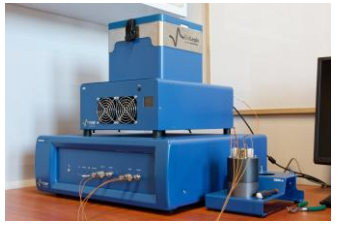
System do pomiarów
właściwości fizycznych
PPMS® DynaCool



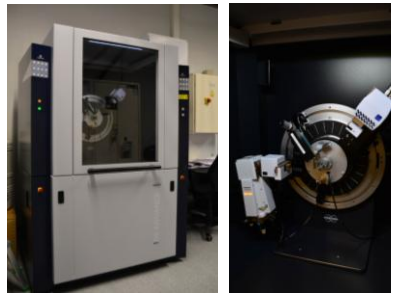
Spektrometr EPR JES-X3100 (JEOL)
pasmo X



Spektrometr dielektryczny
Concept 11 (Novocontrol)



Elektrochemiczny analizator impedancji
BioLogic MTZ-35



proszkowy dyfraktometr
rentgenowski



mikroskop IR z przystawką
temperaturową



spektrofluorymetr UV-vis-NIR
z kriostatem helowym



Spektrofotometr UV-vis-NIR
z przystawką temperaturową



spektrometr dielektryczny i tester
właściwości ferroelektrycznych



termograwimetr



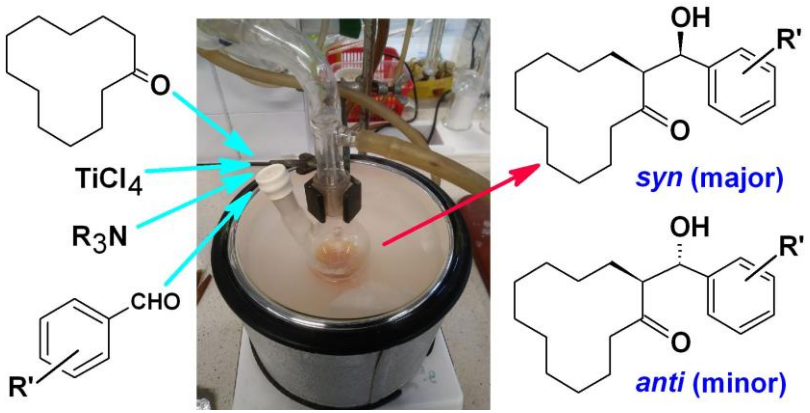
Skaningowy kalorymetr różnicowy
DSC214 Polyma

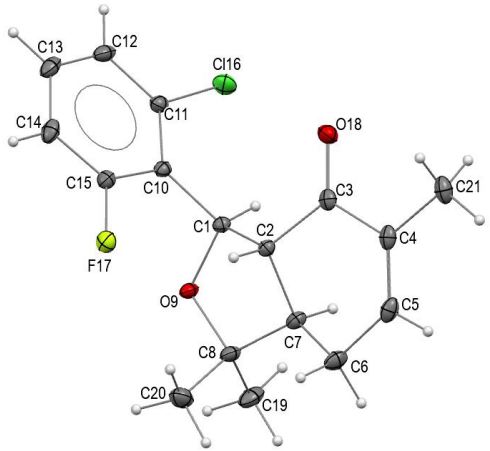
i inne... https://znmm.chemia.uj.edu.pl/aparatura

Zespół Chemii Związków Heterocyklicznych i Metaloorganicznych

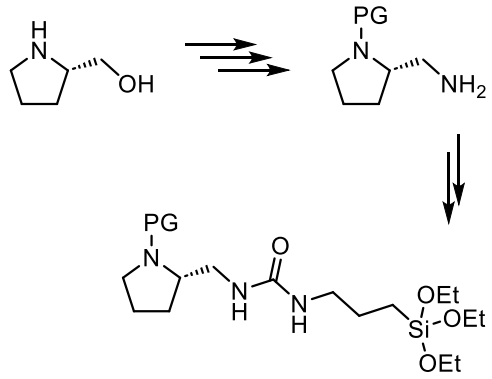
Kierownik Zespołu: dr hab. Dariusz Cież
dariusz.ciez@uj.edu.pl

Reakcje aldolowe enolanów tytanu(IV) cyklicznych ketonów i chiralnych terpenoidów (kamfora, R-karwon, L-menton)

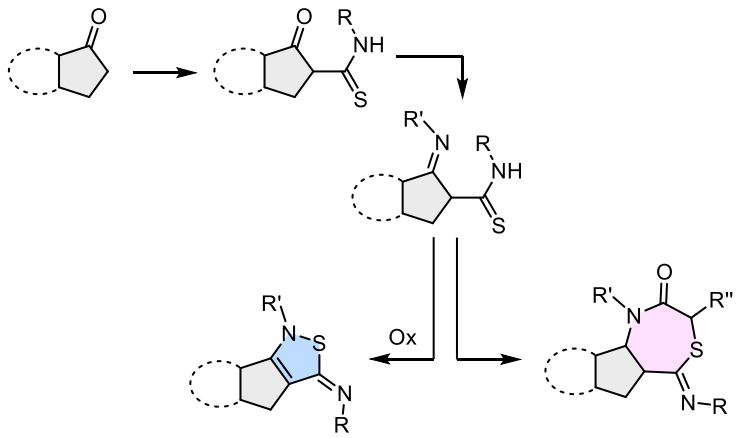




Projektowanie i synteza hybrydowych organiczno-nieorganicznych katalizatorów dla reakcji typu aldolowego



Synteza wielopierścieniowych pochodnych 1,4-tiazepiny i izotiazolu



Poszukiwanie nowych organicznych fotokatalizatorów do reakcji przegrupowania oksazyrydyn
(projekt finansowany ze środków NCN)

Badania mechanizmów organicznych reakcji fotoredoks

Synteza nowych związków, wykazujących właściwości chemiluminescencyjne oraz badanie możliwości ich zastosowania.





Zespół Chemii Koordynacyjnej

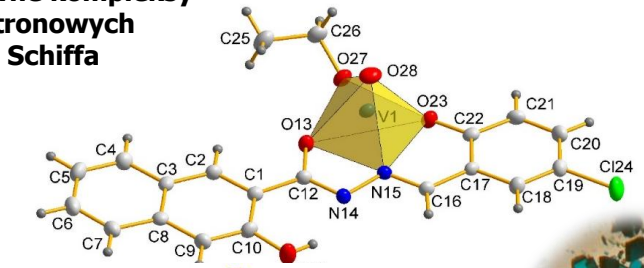
https://tungsten.ch.uj.edu.pl

prof. dr hab. Janusz Szklarzewicz, dr hab. Maciej Hodorowicz, dr Anna Jurowska,
mgr Monika Sternal, mgr Weronika Bogdał, mgr Patryk Milczarek

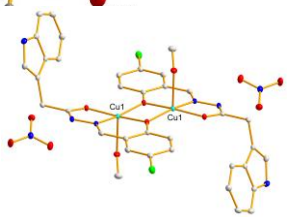
Biologicznie aktywne kompleksy metali d-elektronowych z zasadami Schiffa

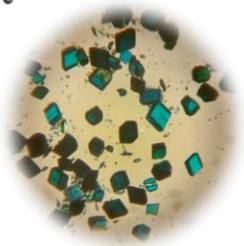


synteza

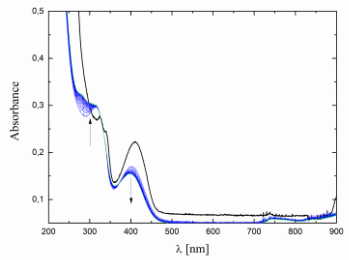


struktura

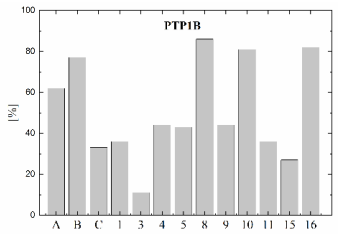




właściwości fizykochemiczne



aktywność biologiczna

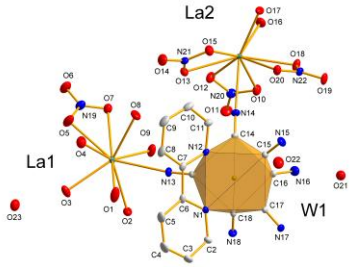


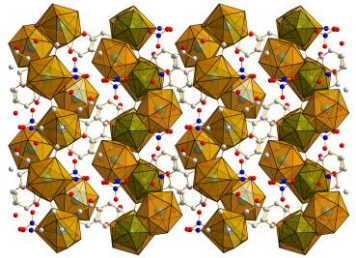
metalofarmaceutyki

J. Mol. Str. 1305 (2024) 137722; J. Mol. Str. 1317 (2024) 139168
Inorganic Chemistry 65 (2026) 11577-11591

Synteza cyjanowych kompleksów W(IV i V)

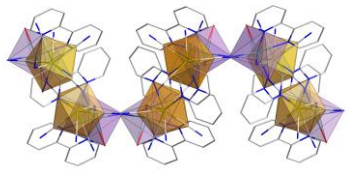
korelacja struktura-właściwości fizykochemiczne

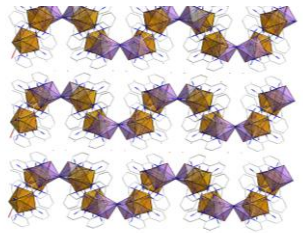




Journal of Molecular Structure 1377 (2026) 147140

Polimeryczne ferromagnetyki wysokotemperaturowe







Patent: EP19183528.9.

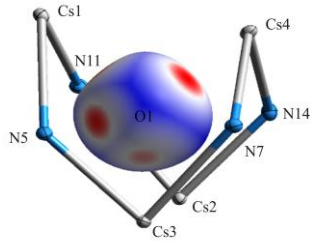
Molecules 27 (2022) 4525

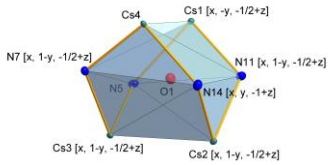
Zespół Chemii Koordynacyjnej

https://tungsten.ch.uj.edu.pl

prof. dr hab. Janusz Szklarzewicz, dr hab. Maciej Hodorowicz, dr Anna Jurowska,
mgr Monika Sternal, mgr Weronika Bogdał, mgr Patryk Milczarek

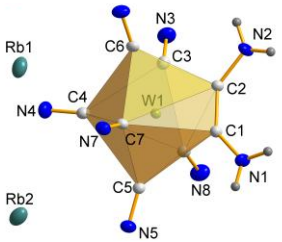
Synteza diaminoacetylenu z ligandów cyjanowych w kompleksie $[W(CN)_6(bpy)]^{4-}$

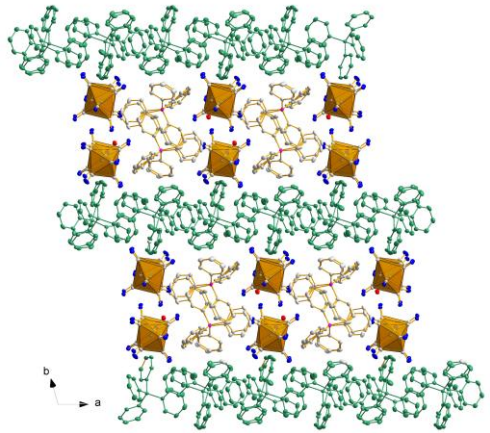


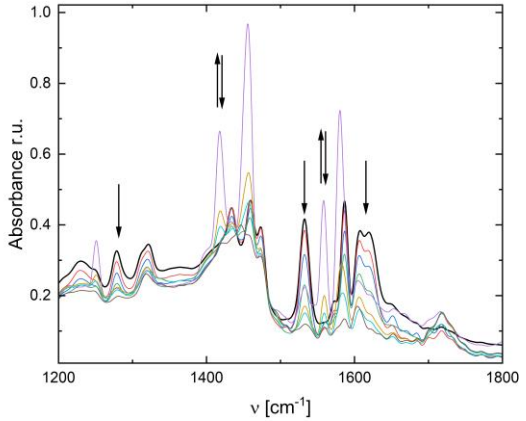


New J. Chem., 2024, 48, 13196–13205



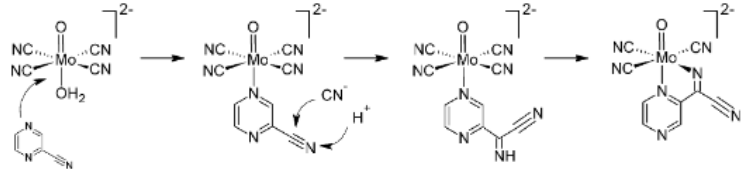




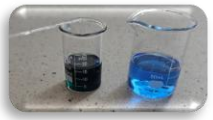


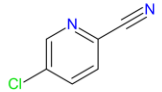
Syntezy nowych związków organicznych (reakcje na ligandzie, reakcje katalizowane)

hydroliza nitryli prowadząca do powstawania
prekursorów nowych aminokwasów
lub wydłużania łańcucha węglowego

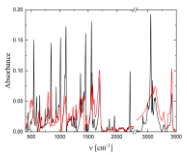


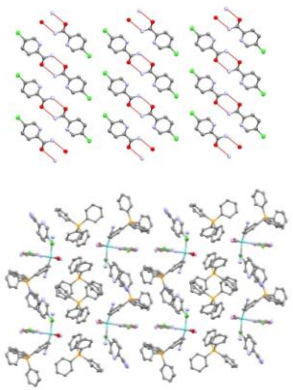
Journal of Molecular Structure 1350 (2026) 143979











ZESPÓŁ STEREOKONTROLOWANEJ SYNTEZY ORGANICZNEJ

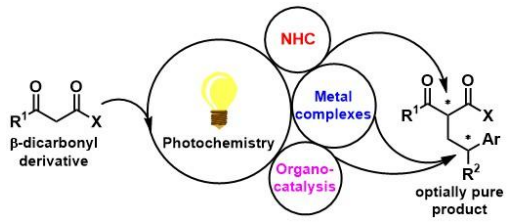
KIEROWNIK ZESPOŁU: DR HAB. ALEKSANDRA PAŁASZ

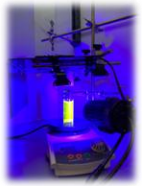
aleksandra.palasz@uj.edu.pl

www: www.sosg-ju.com

Stereocontrolled Organic Synthesis Group

Fotokataliza z pełną kontrolą stereochemii tworzonych wiązań

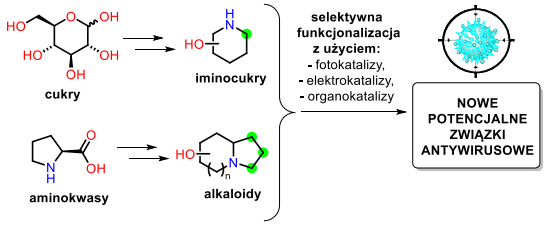




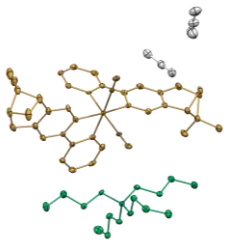
Chemia organiczna wspomagana sztuczną inteligencją



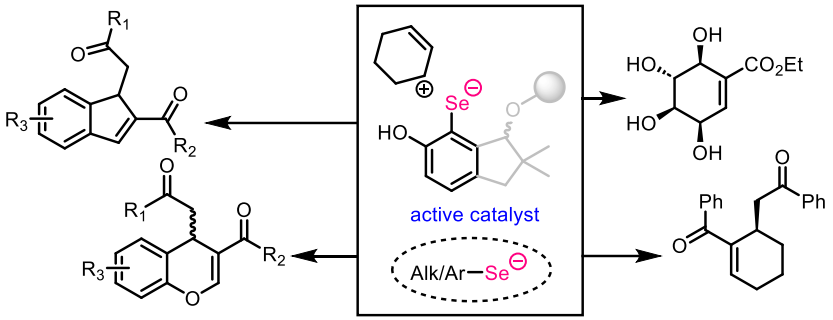
Synteza związków biologicznie czynnych



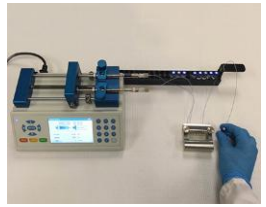
Synteza chiralnych komponentów dla wielofunkcyjnych materiałów molekularnych

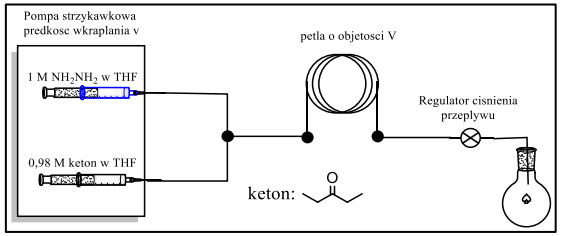


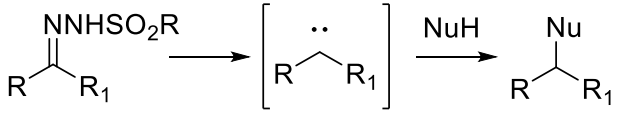
Zastosowanie chiralnych selenolanów w syntezie asymetrycznej



Flow-chemistry: prowadzenie reakcji w warunkach ciągłego przepływu





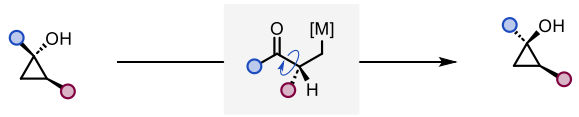




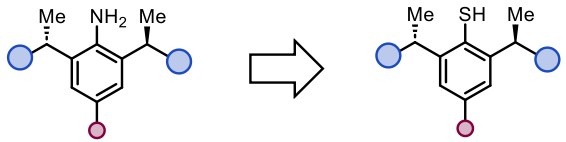


Fotokataliza

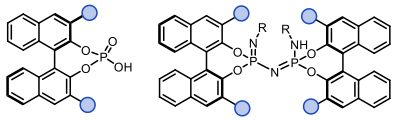
- *Reakcje izomeryzacji z wykorzystaniem metali przejściowych*

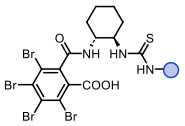


- *Projektowanie chiralnych katalizatorów*



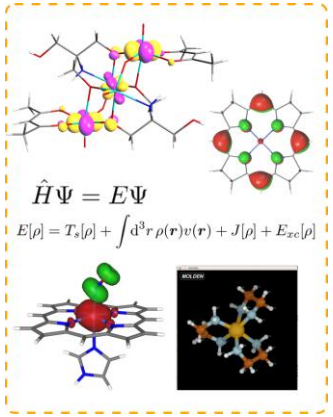
- *Kataliza z wykorzystaniem chiralnych kwasów Brønsteda*





Obliczeniowa chemia koordynacyjna:

kontakt: dr hab. Mariusz Radoń, prof. UJ



https://tungsten.ch.uj.edu.pl/~mradon

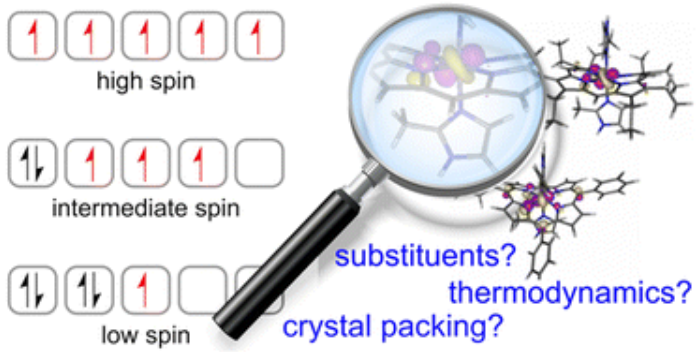
Dostęp do dużych centrów obliczeniowych



Klaster obliczeniowy „ferrum”

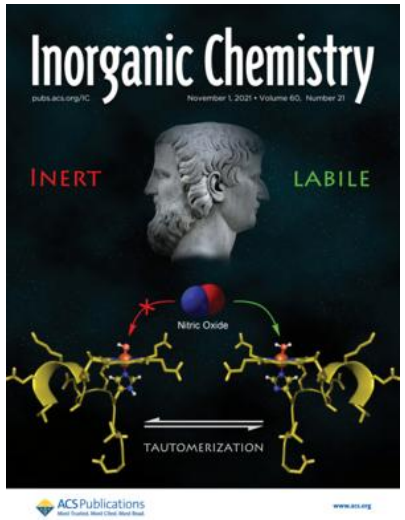
Tematyka badawcza:

1. Struktura elektronowa, właściwości, reaktywność kompleksów metali d-elektronowych oraz modeli centrów aktywnych w metaloenzymach
2. Energie stanów spinowych w kompleksach spin-crossover
3. Ocena dokładności metod obliczeniowych (benchmarki)



Phys. Chem. Chem. Phys. 2024, *26*, 18182

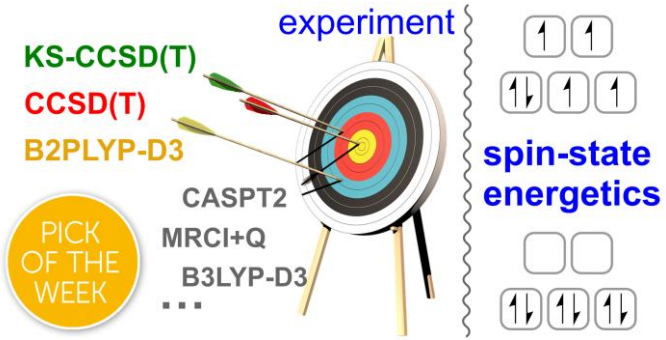
Wybrane publikacje z w/w tematyki:



← Wymiana ligandów na centrum Fe(III) mikroperoksydazy

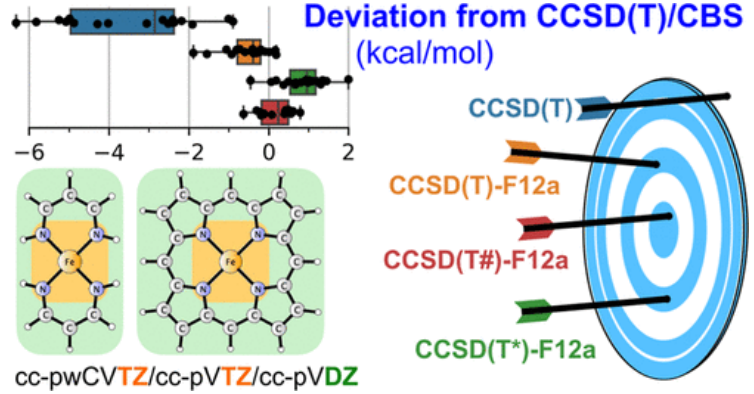
Inorganic Chemistry., 2021, *60*, 15948

Benchmarki „teoria vs eksperyment” dla energetyki stanów spinowych →



Chem. Sci. 2024, *15*, 20189

HOT Article & Pick of the Week 2024



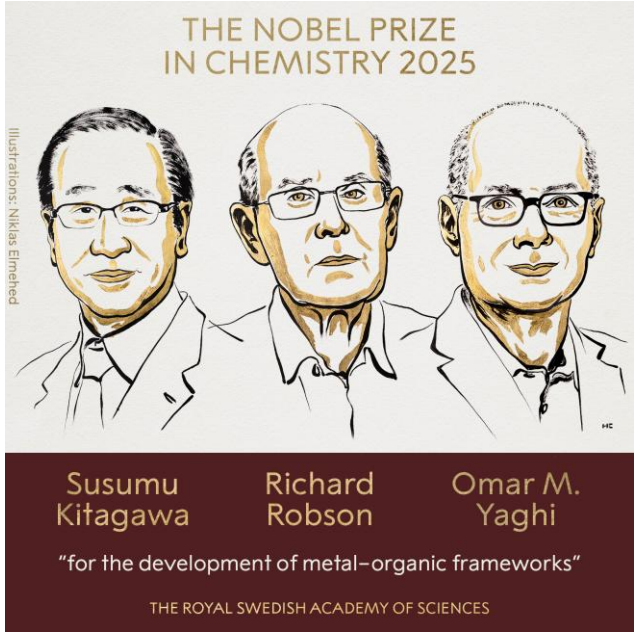
J. Chem. Theory Comput. 2024, *20*, 3199

UNIWERSYTET JAGIELLOŃSKI W KRAKOWIE

matoga.lab

Grupa chemii retikularnej:

kontakt: prof. dr hab. Dariusz Matoga
dr Marzena Pander, Gabriela Kowacz, Krzysztof Dubert,
Philippe Michno, Kharyton Khramenkou, Oliwier Widawski

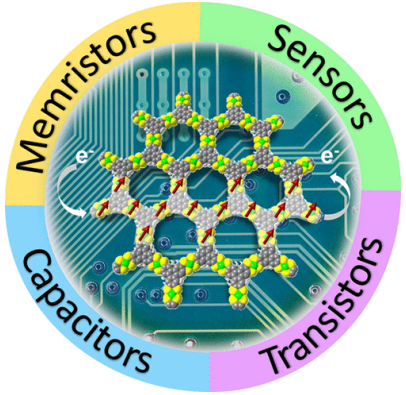


Tematyka badawcza:

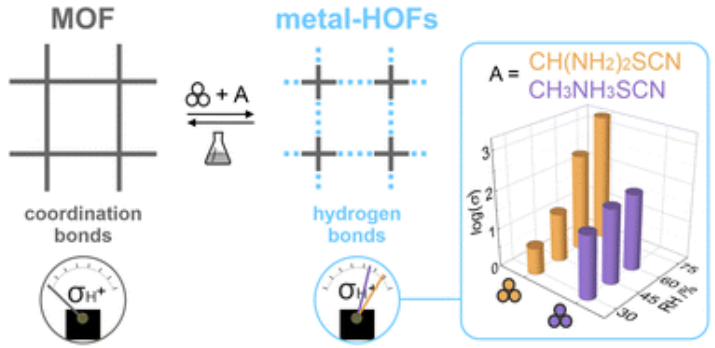
Funkcjonalne szkielety metalo-organiczne (MOF) i układy pokrewne:
Od projektowania i syntezy do zaawansowanych właściwości fizykochemicznych

1. Wydajne przewodzenie protonowe
2. Responsywne materiały porowate
3. Układy hybrydowe i kompozytowe

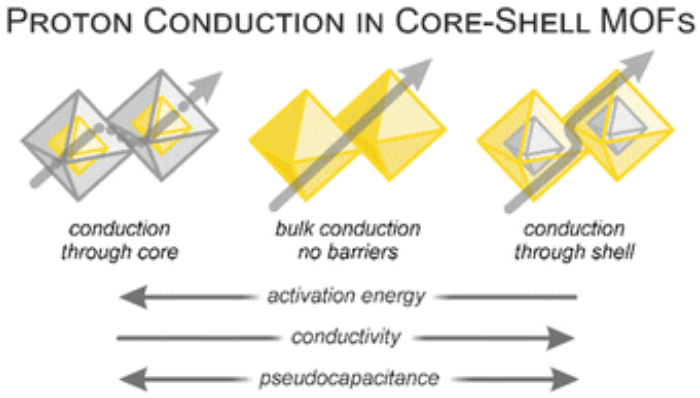
Wybrane publikacje z w/w tematyki:



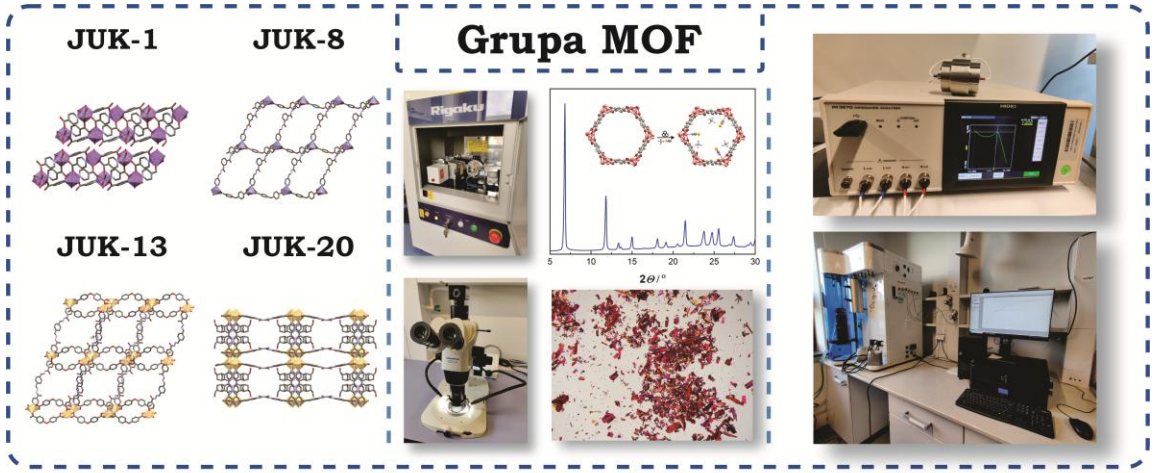
Chem. Rev. 2020, *120*, 8581



Chem.Sci., 2023, 14, 14176



J. Mater. Chem. A, 2025, 13, 23671





Wsparcie finansowe

NATIONAL SCIENCE CENTRE POLAND

Diamentowy Grant

Polish Ministry of Science and Higher Education

FNP Start

Foundation for Polish Science

Współpraca

krajowa, zagraniczna

UAM

UNIVERSITAS WRATISLAVIENSIS

TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

UNIVERSIDAD DE GRANADA

Sandia National Laboratories

@MatogaLab

#matoga.lab

cost EUROPEAN COOPERATION IN SCIENCE & TECHNOLOGY

EU4MOFs

ZESPÓŁ CHEMII BIOORGANICZNEJ I MEDYCZNEJ

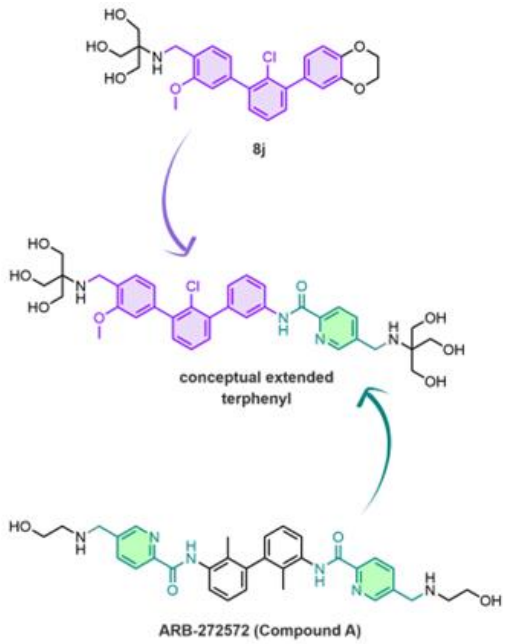
KIEROWNIK ZESPOŁU: DR HAB. ŁUKASZ SKALNIAK, PROF. UJ

email: lukasz.skalniak@uj.edu.pl

Bioorganic and Medicinal Chemistry Group

SYNTEZA ORGANICZNA → **BIOAKTYWNOŚĆ I TERAPIE CELOWANE**

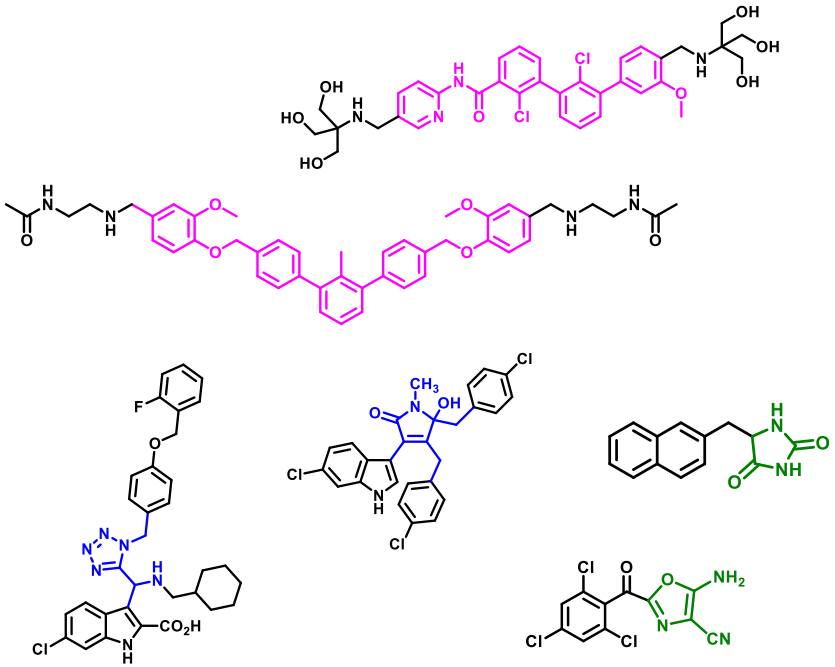
→ WYBÓR CELU MOLEKULARNEGO I PROJEKTOWANIE ZWIĄZKÓW



→ SYNTEZA ORGANICZNA

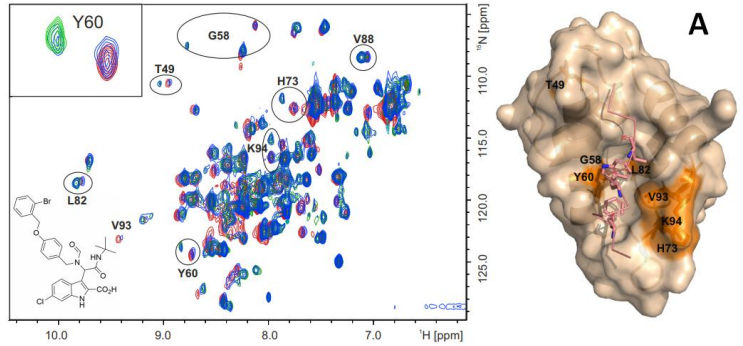
→ UROZMAICONE STRATEGIE SYNTETYCZNE I ANALITYCZNE

→ OCHRONA PATENTOWA I PUBLIKOWANIE WYNIKÓW

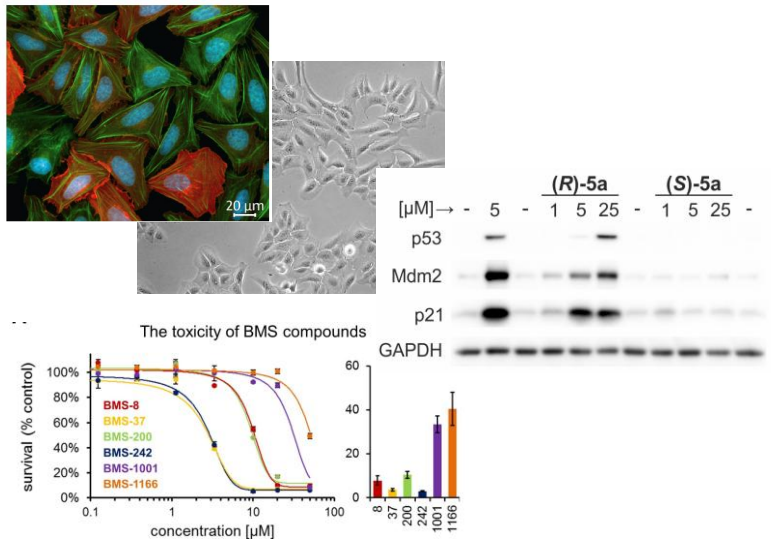


→ BIOAKTYWNOŚĆ

Spektroskopia NMR i krystalografia



Testy biochemiczne i komórkowe



Zespół Inżynierii Krystalicznej i Analizy Strukturalnej

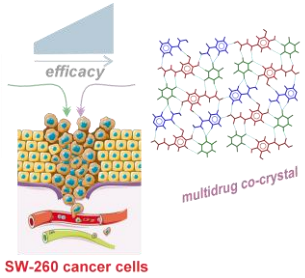
http://www.zikas.chemia.uj.edu.pl

Skład Zespołu: Dr hab. Marlena Gryl, prof. UJ (kierownik),
dr Agnieszka Skórska-Stania, prof. dr hab. Katarzyna M. Stadnicka,
dr Szymon Grabowski, dr Martin Zábranský



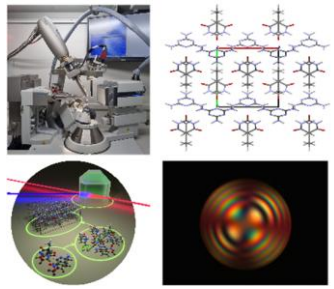
Projektowanie materiałów wieloskładnikowych w oparciu o nowoczesne techniki inżynierii krystalicznej





Otrzymywanie i badania biologiczne nowych **kokryształów leków** oraz **biomateriałów**

Badania strukturalne i pomiary właściwości fizycznych materiałów funkcjonalnych





Krystalografia kwantowa, obliczenia właściwości optycznych i elektrycznych kryształów molekularnych

Kontakt: marlena.gryl@uj.edu.pl
agnieszka.skorska-stania@uj.edu.pl
szymon.grabowski@uj.edu.pl

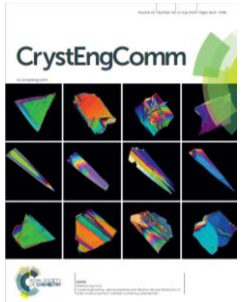
Poszukiwani studenci do współpracy w projektach

NCN OPUS 26: Modułowe projektowanie układów złożonych kokryształów do zastosowań w optoelektronice, sterowane metodami krystalografii kwantowej

EU COST: CA22107: Bringing Experiment and Simulation Together in Crystal Structure Prediction









Zespół Strukturalnej Dyfraktometrii Proszkowej

Kryształ odrzucony przez badających – stał się źródłem danych strukturalnych

Gwarancja ciekawych badań

Aparatura;
Nowoczesny dyfraktometr proszkowy z unikalnymi w skali kraju przystawkami. Zakupiony w ramach programu ATOMIN 2.0
Zakres badanych temperatur: 13 – 1600 K

Ciekawe tematy badan:
1) Badania strukturalne pigmentów naftaleno-azowych
2) Katalityczna obróbka materiałów odnawialnych
3) Pionierskie metody w badaniach biomas ligninowych
4) Symetria i autentyczność zabytków i dziel sztuki
5) Metody XRPD w testach procesów termicznych otrzymywania materiałów energetycznych
6) Ligniny jako baza materiałów użytkowych. Monitoring przy użyciu metod XRPD

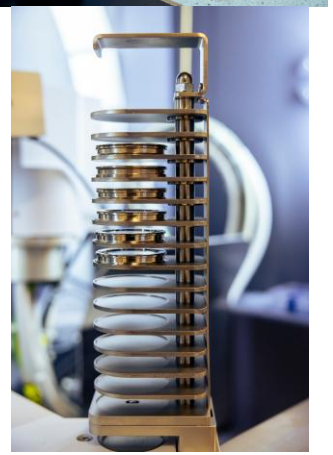
Zespół badawczy przodujący w badaniach XRPD w kraju:
prof. dr hab. Wiesław Łasocha, dr Marcin Kozieł, dr Marcin Oszajca, dr Michał Duda, dr Marek Michalec, dr Andrzej Olech

Ścieżki kariery:
Rigaku, uniw. Norwegia, grupa Azoty, Selvita, Solaris, W. Ch. UJ

Współpraca:
-Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN
-International Centre for Diffraction Data (USA)



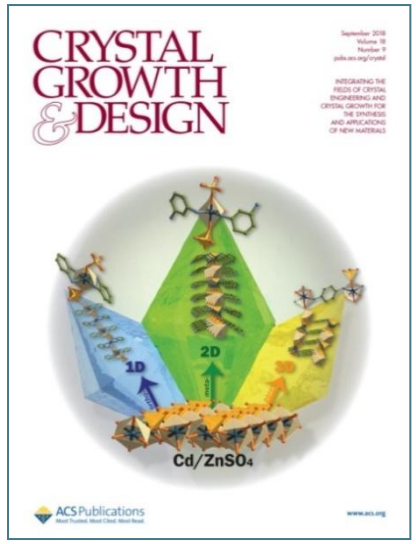




Dyfraktometr Malvern PANalytical Empyrean

Przykłady badań (pigmenty, tapeta, groty strzał)





dr hab. Monika Srebro-Hooper, prof. UJ
Zakład Chemii Teoretycznej
Zespół Chemii Kwantowej

monika.srebro@uj.edu.pl • C3-09

Zastosowanie obliczeń kwantowo-chemicznych w projektowaniu i charakterystyce nowych związków molekularnych i supramolekularnych

DFT / TDDFT
struktura | stany wzbudzone
właściwości elektronowe

Oddziaływania niekowalencyjne
wiązania wodorowe, π–π, anion–π, kation–π, oddziaływania w roztworze i w stanie stałym

Symulacja widm
UV–Vis, emisja, ECD, CPL, IR, NMR

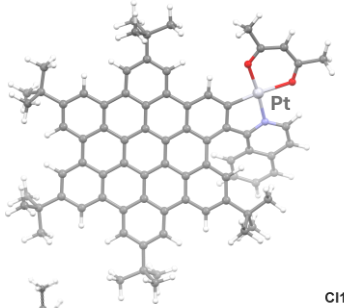
Analiza mechanizmów
ESIPT, PET, TICT, ILCT i przejścia międzysystemowe

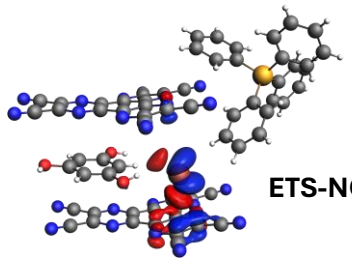


Projektowanie molekularne
racjonalne modyfikacje struktury i właściwości

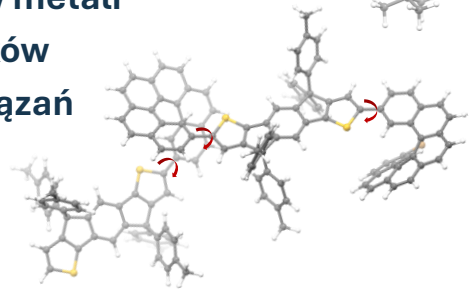
STRUKTURA
GEOMETRIA I ODDZIAŁYWANIA

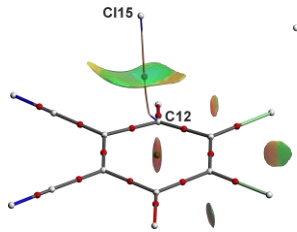
- optymalizacja geometrii
- izomeria i konformacje
- koordynacja jonów metali
- wpływ podstawników
- energia i natura wiązań oraz oddziaływań

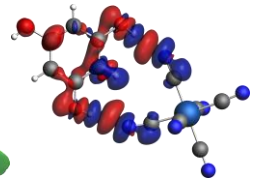




ETS-NOCV



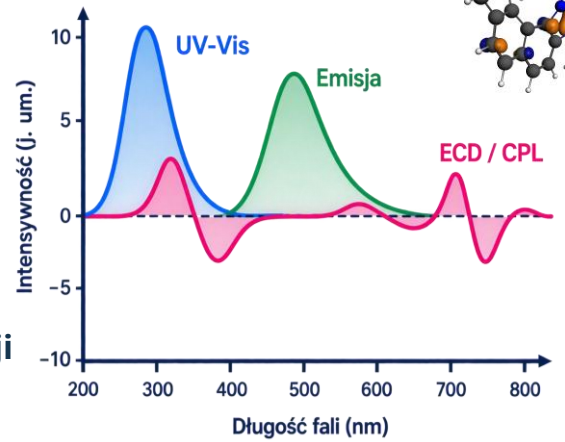


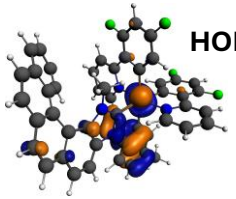


QTAIM, NCI

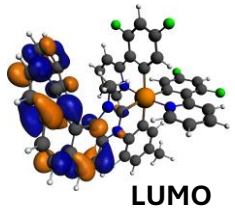
WIDMA
INTERPRETACJA | PRZEWIDYWANIE

- symulacja i interpretacja widm
- przypisanie pasm i przejść
- charakterystyka stanów wzbudzonych
- parametry fotofizyczne i mechanizmy dezaktywacji
- wpływ rozpuszczalnika i agregacji
- korelacje struktura–właściwości



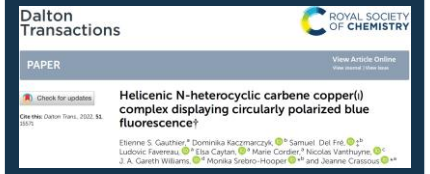


HOMO



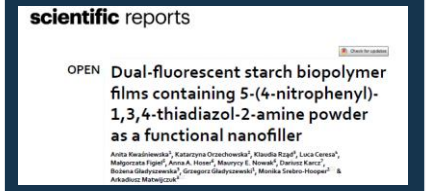
LUMO

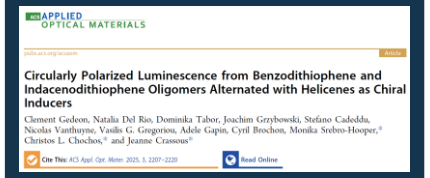
Wybrane artykuły z udziałem studentów II. stopnia













Zespół Badań Materiałów Roślinnych



dr hab. Magdalena Kurdziel
kierownik zespołu
mk.kurdziel@uj.edu.pl

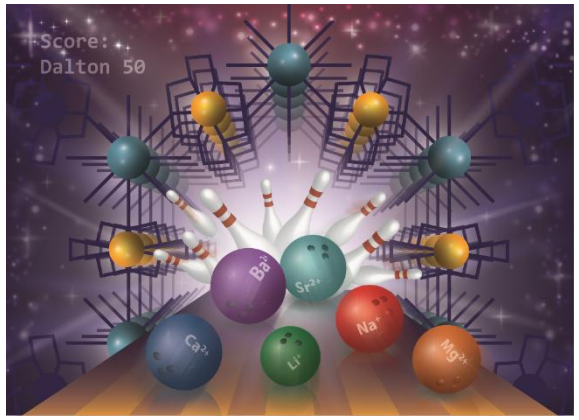
dr hab. Beata Nowicka, prof. UJ
beata.nowicka@uj.edu.pl



dr Dominik Czernia
Grant Sonatina 8,
2024/52/C/ST5/00264

Mgr Gaja Wota





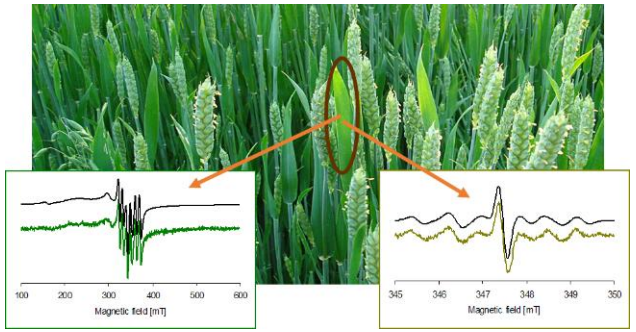


Współpracujemy z Instytutem Fizyki Jądrowej PAN, Uniwersytetem Rolniczym, Uniwersytetem w Kilonii, oraz Centrum Wysokich Pól Magnetycznych w Osace

Konstruujemy sieci koordynacyjne oraz łączymy je z polimerami organicznymi w funkcjonalne nanokompozyty



Badamy jak fizyczne i chemiczne modyfikacje skrobi wpływają na jej strukturę i właściwości fizykochemiczne





Badamy procesy sorpcji wody i par rozpuszczalników organicznych w układach porowatych, hydratach oraz związkach naturalnych

https://zbmr.chemia.uj.edu.pl/

Zapraszamy!