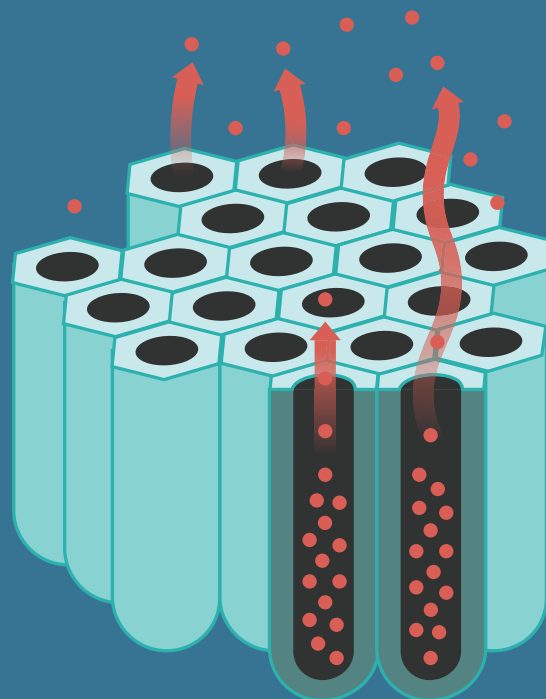




**NAUKI
ŚCISŁE**



UKŁADY
NANOPORÓW
/ NANORUREK
 TiO_2

UNIKATOWE WŁAŚCIWOŚCI
ZASTOSOWANIA



MAGAZYNOWANIE
ENERGII

BATERIE LITOWO-
-JONOWE

SUPERKONDENSATORY



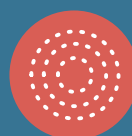
KONWERSJA
ENERGII

ROZKŁAD
WODY



ŚRODOWISKOWE

DEGRADACJA
ZANIECZYSZCZEŃ



SENSORY



BIOMEDYCZNE

NOŚNIKI
LEKÓW

**NANOSTRUKTURALNY TiO_2 –
OD MEDYCYNY DO ENERGETYKI**

Współczesny świat, nieustannie napędzany przed szybki rozwój cywilizacyjny, stawia przed nami wiele niemałych wyzwań. Do najważniejszych z nich należy pozyskiwanie czystej energii ze źródeł odnawialnych oraz konieczność nieustannego rozwoju ochrony zdrowia. Niezwykle interesujący materiał, który znajduje zastosowanie zarówno w procesie pozyskiwania energii ze światła słonecznego, jak i w produkcji nowoczesnych implantów, to ditlenek tytanu (TiO_2). Badania nad rozwojem elektrochemicznych metod otrzymywania jego nanostrukturalnych warstw prowadzone są w Zespole Elektrochemii UJ już od ponad 10 lat. Co sprawia, że ten wyjątkowy materiał jest aż tak wszechstronny?

Aby wytworzyć materiały nanostrukturalne, tytan poddawany jest stosunkowo prostemu procesowi anodyzacji. Jest to proces kontrolowanej elektrolizy, w wyniku której na powierzchni metalu powstaje cienka powłoka porowatego TiO_2 o charakterystycznej budowie. Co szczególnie istotne, w tego rodzaju warstwie tlenkowej o powierzchni 1 cm^2 może znajdować się nawet 10 miliardów równoległych do siebie kanalików o średnicy od kilkunastu do kilkuset nanometrów (1 nanometr to miliardowa część metra). Nanostrukturalny TiO_2 budzi szczególne zainteresowanie badaczy z uwagi na jedyne w swoim rodzaju właściwości, jak choćby obiecujące właściwości fotokatalityczne (umożliwiające zachodzenie lub znaczące przyspieszenie reakcji chemicznych pod wpływem światła), wysoką stabilność (odporność na działanie czynników chemicznych) i niską toksyczność.

Obecne badania koncentrują się przede wszystkim na praktycznych zastosowaniach tego rodzaju materiałów, spośród których na szczególną uwagę zasługują dwa warianty: nowoczesne wielofunkcyjne implanty oraz możliwość otrzymywania wodoru z wykorzystaniem energii słonecznej.

Niezawodne implanty

W obecnych czasach żyjemy coraz dłużej, ale i coraz aktywniej. Poza oczywistymi zaletami tego zjawiska wiąże się ono także z nieco bardziej przykrymi konsekwencjami. Przede wszystkim naraża nas na wiele kontuzji, również tych związanych z układem kostnym. Te bardziej skomplikowane złamania wymagają wszczęcia implantu kostnego, który powinien służyć nam jak najdłużej. Niestety, obecnie stosowane materiały wystarczają tylko na kilkanaście lat, a często problemy z nimi pojawiają się dużo szybciej. Wynikają one głównie z zakażeń bakteryjnych albo z niezbyt dokładnego dopasowania implantu do ubytku. Dlatego też naukowcy poszukują rozwiązań, które zapobiegłyby tym problemom. Jednym z nich jest stworzenie implantu idealnie dopasowanego do konkretnego pacjenta, w czym pomocne są techniki obrazowania i drukowania 3D. Aby jeszcze bardziej spersonalizować implant, wytwarza się na nim nanostrukturalną warstwę tlenku, która dzięki swojej specyficznej budowie umożliwia wzbogacenie implantu w czynniki o właściwościach bakteriobójczych (np. nanocząstki lub antybiotyki). Takie wielofunkcyjne implanty mają szansę zrewolucjonizować współczesną

medycynę, pozwalając pacjentom dużo dłużej cieszyć się sprawnością po zabiegach implantacyjnych.

Energia z wodoru

Trwający obecnie światowy kryzys energetyczny wiąże się z poszukiwaniem źródeł tak zwanej czystej energii. Niewątpliwie bardzo atrakcyjne rozwiązanie tego problemu stanowi wykorzystanie gazowego wodoru do gromadzenia energii ze źródeł odnawialnych. Spośród wszystkich znanych paliw jest to najczystszy i najbardziej nieinwazyjny dla środowiska naturalnego nośnik energii. Nanostrukturalne warstwy TiO_2 można również z powodzeniem zastosować w urządzeniach do otrzymywania wodoru z wody w tak zwanych ogniach fotoelektrochemicznych. Są one zbudowane z materiału półprzewodnikowego (np. TiO_2), posiadającego zdolność do pochłaniania promieniowania świetlnego, oraz elektrody metalicznej (np. blaszki platynowej). Podczas procesu zwanego fotoelektrolizą pod wpływem światła słonecznego dochodzi do rozkładu wody na gazowy wodór i tlen. Pozyskiwany w ten sposób czysty wodór jako paliwo stanowi najlepszą odpowiedź na wyzwania związane z globalnym ociepleniem oraz kryzysem energetycznym. Obecne badania skupiają się przede wszystkim na opracowaniu metod otrzymywania i modyfikacji nanostrukturalnych warstw TiO_2 pozwalających na zwiększenie wydajności ogniów fotoelektrochemicznych, co umożliwi pozyskiwanie wodoru z wody na dużą skalę z wykorzystaniem promieniowania słonecznego.

Przedstawione przykłady to tylko niektóre z zastosowań elektrochemicznie wytwarzanych nanostrukturalnych warstw TiO_2 , nad którymi pracują obecnie pracownicy, doktoranci i studenci Zespołu Elektrochemii UJ. Prowadzone są również badania nad wykorzystaniem tego rodzaju materiałów jako nowoczesnych czujników fotoelektrochemicznych, niewielkich i prostych w działaniu urządzeń służących do szybkiego i dokładnego oznaczania stężeń różnych związków, na przykład glukozy, jak również efektywnego usuwania zanieczyszczeń z wody pod wpływem promieniowania słonecznego.

i

dr Magdalena Jarosz, dr Joanna Kapusta-Kołodziej, dr Karolina Syrek, prof. Grzegorz Sulka, Zespół Elektrochemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, www.elektro.chemia.uj.edu.pl

Badania finansowane ze środków Narodowego Centrum Nauki (projekty nr UMO-2016/23/B/ST5/00790 oraz UMO-2017/25/B/ST8/01599).



|| SZUKANIE (CZARNEJ) DZIURY W (CAŁYM) OBSERWATORIUM

W 2020 roku laureatami Nagrody Nobla w dziedzinie fizyki zostali Roger Penrose, Reinhard Genzel i Andrea Ghez – kosmolog i dwoje astronomów. Łączy ich to, że na różne sposoby badają tajemnicze obiekty zwane czarnymi dziurami. Nie wszyscy jednak wiedzą, że czarne dziury są też jednym z „ulubionych” tematów badawczych pracowników Obserwatorium Astronomicznego Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie.

Gdy w sierpniu 2017 roku detektory LIGO i Virgo niezależnie zidentyfikowały sygnały pochodzące od poszukiwanych przez dekady fal grawitacyjnych, niemal dokładnie w tym samym czasie instrument znajdujący się na pokładzie teleskopu orbitalnego NASA zarejestrował na niebie jasny rozbłysk gamma. Nieco później w tym miejscu zaobserwowano też błysk w świetle widzialnym. Te z pozoru niezwiązane ze sobą zjawiska zidentyfikowano wkrótce potem jako następstwo zderzenia się dwóch gwiazd neutronowych. Warto dodać, że fale grawitacyjne różnią się od „zwykłych” fal elektromagnetycznych (np. światła) nie tylko długością. Są pod względem fizycznym odmiennie propagującym się w czasoprzestrzeni tworem, za którym stoi złożona matematyka. Detekcje z 2017 roku dały tym samym początek tak zwanej astronomii wieloaspektowej (ang. *multimessenger astronomy*), łączącej cele i możliwości klasycznych obserwacji nieba z badaniami fal grawitacyjnych.

Z ubiegłoroczną Nagrodą Nobla jest podobnie. Choć nie dotyczy ona bezpośrednio fal grawitacyjnych, honoruje badania naukowe realizowane na odmiennych płaszczyznach: teoretycznej i obserwacyjnej. Jej połowę przyznano Penrose’owi za całokształt wieloletniej pracy, łącznie z odkryciem, że formowanie się czarnych dziur wynika z ogólnej teorii względności (OTW) Einsteina. Drugą połowę otrzymali Genzel i Ghez, którzy po wieloletnich obserwacjach wykazali istnienie masywnego obiektu leżącego w centrum Drogi Mlecznej. W obszarze nie większym niż Układ Słoneczny znajduje się tam masa odpowiadająca czterem milionom mas Słońca! Wiemy już, że może to być tylko czarna dziura. W dużej mierze właśnie dzięki tym uczonym czarne dziury, przez lata uważane jedynie za twory matematyczne pojawiające się na gruncie równań OTW, uzyskały status „rzeczywistych” obiektów astrofizycznych. Równania te opisują je jako zakrzywione obszary czasoprzestrzeni, z których nic – łącznie ze światłem – nie jest w stanie uciec przed silnym przyciąganiem grawitacyjnym, wynikającym ze skupienia na niewielkim obszarze bardzo dużej masy. Obiekty te niełatwo zaobserwować, gdyż z definicji są ciemne, a przez to, w przeciwieństwie do gwiazd czy galaktyk, niewidoczne dla teleskopów. O ich obecności naukowcy

mogą jednak wnioskować na różne sposoby, na przykład badając wpływ grawitacyjny tak ogromnych mas na okoliczną materię czy egzotyczne zjawiska związane ze ściąganiem tej materii w bezpośrednią okolicę supermasywnej czarnej dziury, prowadzące do powstawania dżetów (naładowanych cząstek poruszających się niewiele wolniej od samego światła), a w rezultacie w ekstremalnych przypadkach do tworzenia się tak zwanych gigantycznych radiogalaktyk, będących największymi pojedynczymi obiektami Wszechświata.

W Obserwatorium Astronomicznym UJ nie ma dziś zakładu, w którym mniej lub bardziej bezpośrednio nie bada się czarnych dziur. Wiążące się z nimi rozwiązania równań Einsteina oraz inne aspekty teoretyczne analizowane są w Zakładzie Astrofizyki Relatywistycznej i Kosmologii. Czarne dziury i odnoszące się do nich mechanizmy akrecji (ściągania okolicznej materii) są też ważnym przedmiotem badań Zakładu Astrofizyki Wysokich Energii – zarówno pod względem teorii, jak i obserwacji. Z obecnością tych obiektów wiążą się najwyższe obserwowane w Kosmosie energie, towarzyszące między innymi powstawaniu relatywistycznych dżetów wytwarzanych przez masywne czarne dziury rezydujące w centrach galaktyk. Badana jest też ewolucja supermasywnych czarnych dziur i stowarzyszonych z nimi galaktyk aktywnych.

Ostatnie z wyżej wymienionych zagadnień analizowane jest także w dwóch kolejnych zakładach Obserwatorium: Astronomii Gwiazdowej i Pozagalaktycznej oraz Radioastronomii i Fizyki Kosmicznej. Supermasywne, galaktyczne czarne dziury bada się w nich nie tylko jako osobne obiekty, ale i pod względem statystycznym, analizując całe populacje galaktyk aktywnych. Galaktyki te często zawierają dużą czarną dziurę, której obecność prowadzi do powstawania rozległej, rozciągającej się w wielu przypadkach na megaparseki, struktury świecącej jasno na falach radiowych. Można ją badać z użyciem radioteleskopów, natomiast samo aktywne centrum danej galaktyki obserwuje się jednocześnie również za pomocą instrumentów optycznych, jak i na falach podczerwonych, rentgenowskich oraz gamma.

Szczególną klasę galaktyk aktywnych stanowią blazary. Ich promieniowanie zdominowane jest przez relatywnie wzmocnioną emisję dżetów, obserwowanych pod niewielkim kątem względem obserwatora na Ziemi. W przypadku blazara SBS B1646+499, badanego wspólnie przez naukowców z trzech różnych zakładów naukowych OA UJ, okazuje się, że galaktyka ta – a więc i czarna dziura znajdująca się w jej centrum – przeszła w przeszłości co najmniej dwie osobne fazy aktywności, a zaobserwowane wokół niej rozległe obszary silnej emisji radiowej są pozostałością po pierwszej z nich.

Podobnie jest ze słynnym blazarem OJ287. Niedawne obserwacje przewidywanego pojaśnienia tej odległej galaktyki potwierdziły hipotezę, zgodnie z którą w jej centrum znajduje się nie jedna, a dwie supermasywne czarne dziury. Ich wyniki przygotowały grunt pod planowane

zobrazowanie pary czarnych dziur OJ287 przez teleskop EHT, wspierają też międzynarodowe wysiłki na rzecz bezpośredniego wykrywania fal grawitacyjnych emitowanych przez takie pary masywnych obiektów. Nowe dane potwierdziły również unikatową teoretyczną właściwość czarnych dziur, odkrytą przez Stephena Hawkinga i jego współpracowników – brak tak zwanych „włosów”, czyli nierówności ich powierzchni.

OJ287 i inne galaktyki aktywne są monitorowane w Obserwatorium od ponad dekady, a w badaniach oraz obserwacjach tych lub innych czarnych dziur bierze udział blisko połowa wszystkich pracowników jednostki, w tym liczni doktoranci. Po raz kolejny okazuje się zatem, że połączenie sił (i wiedzy!) różnych naukowców pozwala na efektywne odkrywanie tajemnic tych najbar dziej zagadkowych dla nauki obiektów.

i

dr Elżbieta Kuligowska
Obserwatorium Astronomiczne UJ

Nr grantu: NCN 2018/29/B/ST9/01793, badania prowadzone w Zakładzie Astronomii Gwiazdowej i Pozagalaktycznej OA UJ.



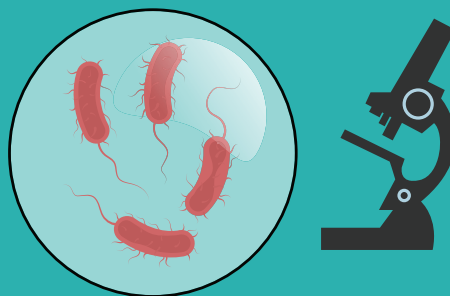
**Słuchaj podcastu popularnonaukowego
Przystanek #misjaUJ dostępnego w serwisach
podcastowych i na stronie:**

misja.uj.edu.pl



1

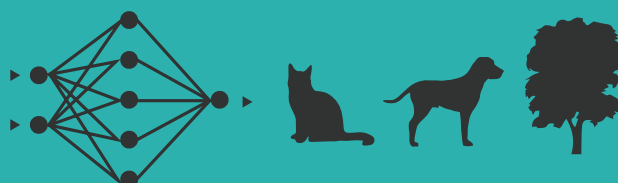
DANE WEJŚCIOWE (OBRAZ MIKROSKOWY)



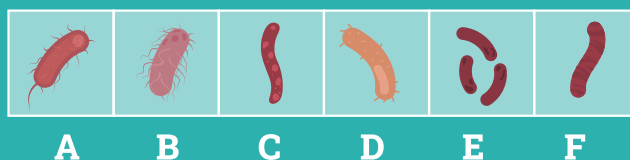
2

ANALIZA DANYCH

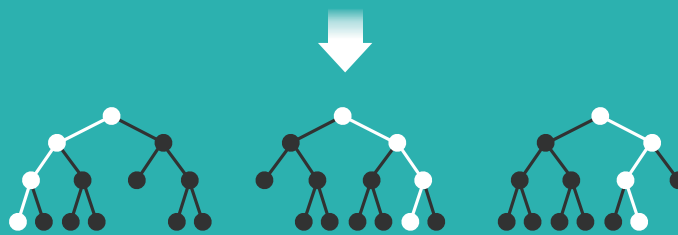
GLEBOKA SIEC NEURONOWA
KORZYSTAJĄCA Z METODY
TRANSFERU WIEDZY



WSTĘPNY WYNIK



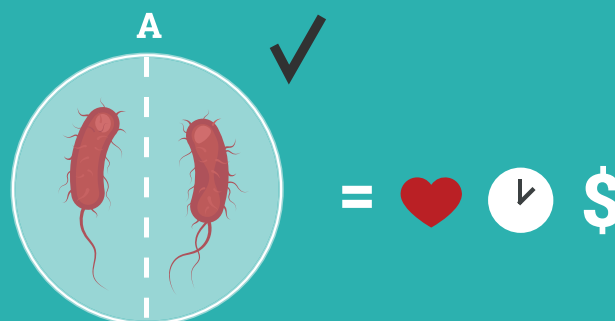
DALSZE
DOPASOWANIE.
KLASYFIKACJA
METODĄ LASÓW
LOSOWYCH
(WIELE DRZEW
LOSOWYCH)



3

DANE WYJŚCIOWE

NAJCZĘŚCIEJ PODAWANY
WYNIK PRZEZ DRZEWIA LOSOWE



PORTRET PAMIĘCIOWY ZABÓJCZYCH PATOGENÓW

Czy sztuczna inteligencja w najbliższych latach zrewolucjonizuje tradycyjne metody stosowane w diagnostyce mikrobiologicznej? Czy zastosowanie głębokich sieci neuronowych umożliwi szybką identyfikację chorobotwórczych patogenów człowieka i przyspieszy skuteczną terapię pacjentów? Odpowiedzi na te pytania szuka zespół badaczy z Katedry Mikrobiologii UJ CM oraz Instytutu Informatyki i Matematyki Komputerowej UJ.

W rutynowej diagnostyce mikrobiologicznej procedura identyfikacji gatunkowej składa się z wielu etapów. Czas jej trwania wynosi do kilku dni, a w sytuacji drobnoustrojów wolno namnażających się na sztucznych pożywkach nawet do kilku tygodni. Proces ten może wyglądać zupełnie inaczej, jeśli zastosujemy metodę opartą na głębokim uczeniu maszynowym (ang. *deep learning*). W tym przypadku procedura identyfikacji gatunkowej oparta na rozpoznawaniu obrazów mikroskopowych z hodowli mikroorganizmów może zostać skrócona do kilkunastu godzin, a nawet, kiedy opiera się na bezpośrednich materiałach klinicznych, do kilku minut! To innowacyjne podejście nie tylko znacznie ogranicza koszty i nakład pracy, ale przede wszystkim istotnie skraca czas identyfikacji drobnoustrojów powodujących groźne dla życia zakażenia. Przyspiesza postawienie właściwej diagnozy, a co za tym idzie – szybkie wdrożenie skutecznej terapii przeciwdrobnoustrojowej, gwarantujące wyleczenie pacjenta.

Głębokie uczenie maszynowe rozwiązuje coraz bardziej skomplikowane problemy na poziomie skuteczności zbliżonym do ludzkiego (np. w przypadku klasyfikacji zdjęć czy tłumaczenia tekstu z jednego języka na drugi). Jednakże wymaga do tego setek tysięcy obserwacji

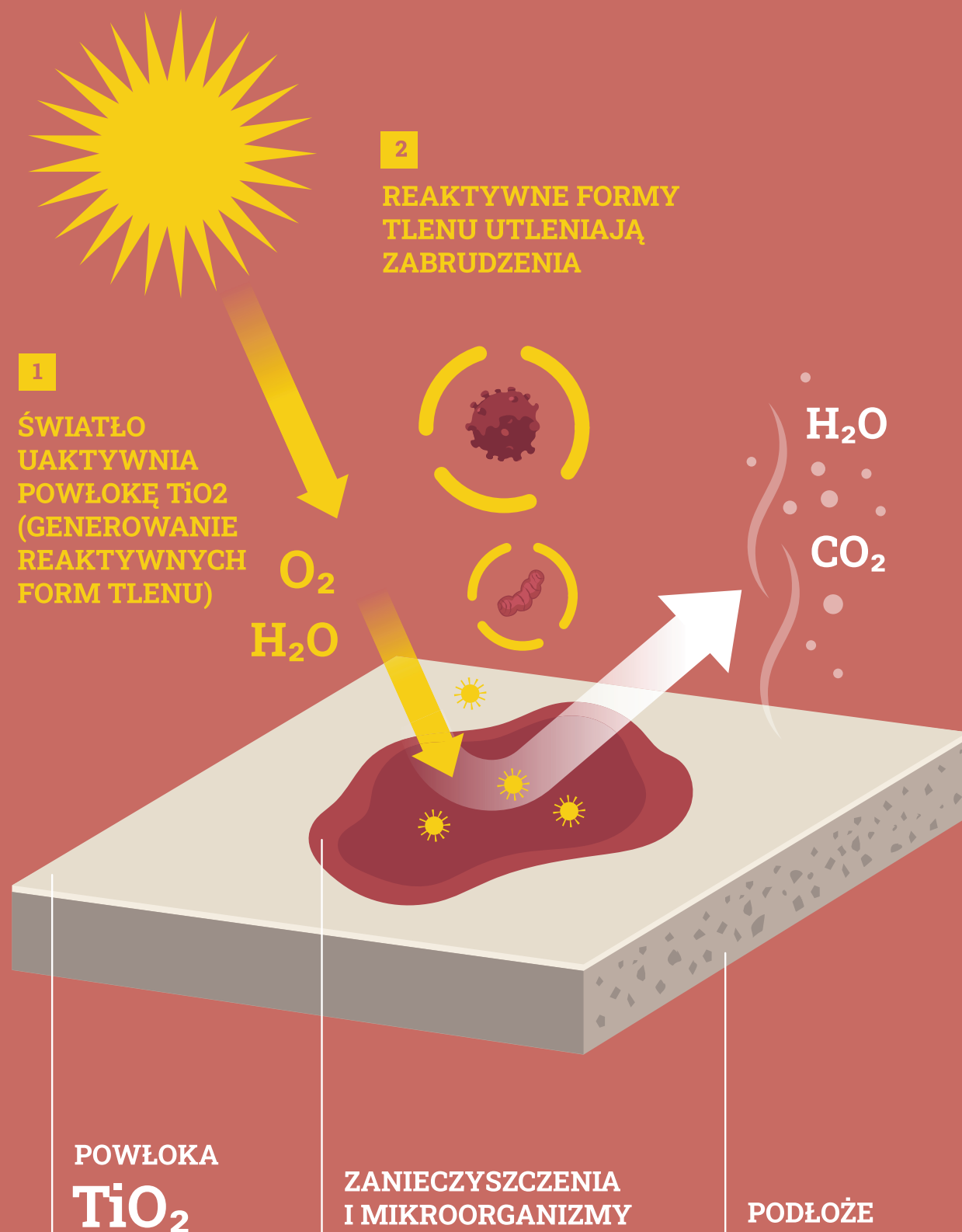
treningowych, co w znacznym stopniu wyklucza ich aplikację w problemach medycznych. Dlatego naukowcy w prowadzonych badaniach zastosowali metody transferu wiedzy (ang. *transfer learning*), w których głęboka sieć neuronowa (ang. *deep neural network*) wytrenowana na obrazach naturalnych (takich jak psy, koty i drzewa) była wykorzystana do uzyskania reprezentacji obrazu mikroskopowego. Następnie reprezentacja ta była klasyfikowana przy użyciu lasów losowych (ang. *random forest*).

Uzyskane wyniki, opublikowane między innymi w czasopiśmie PLOS ONE, nie tylko wskazują na wysoką skuteczność rozpatrywanych metod, ale także zawierają szczegółową analizę działania modeli przy pomocy metod wyjaśnialnej sztucznej inteligencji (ang. *explainable artificial intelligence*), która szczegółowo tłumaczy cechy obrazów istotne w klasyfikacji, zwiększając zaufanie do zaproponowanego rozwiązania. Obecnie prace zespołu koncentrują się na klasyfikacji wielu patogennych gatunków bakterii oraz chorobotwórczych grzybów drożdżopodobnych w mieszaninie oraz na rozróżnianiu klonów tego samego gatunku, co jest szczególnie istotne w analizie bezpośrednich materiałów klinicznych, a także w prowadzeniu dochodzeń epidemiologicznych w celu wykrycia źródeł zakażenia.

i

dr hab. Monika Brzychczy-Włoch, prof. UJ, dr Agnieszka Sroka-Oleksiak, mgr Dorota Ochońska,
Katedra Mikrobiologii, Zakład Molekularnej Mikrobiologii Medycznej, Wydział Lekarski, Uniwersytet Jagielloński Collegium Medicum

dr Bartosz Zieliński, mgr inż. Dawid Rymarczyk, mgr Adrianna Borowa,
Instytut Informatyki i Matematyki Komputerowej, Wydział Matematyki i Informatyki UJ



**FOTOKATALIZA,
CZYLI KATALIZA
NAPĘDZANA ŚWIATŁEM**

Dwutlenek tytanu, biel tytanowa czy E171 to wiele nazw, pod którymi kryje się ta sama substancja: TiO_2 . Ten biały, niepozorny i niezbyt reaktywny materiał znajduje zaskakująco wiele zastosowań. Jako składnik filtrów do opalania i innych kosmetyków absorbuje promieniowanie UV, chroniąc nas przed jego rakotwórczym działaniem. Dzięki niskiej reaktywności i swoim właściwościom optycznym znajduje zastosowanie jako biały pigment oraz dodatek do żywności. Jednak w tym stosunkowo prostym materiale drzemie ogromna siła, która ujawnia się po oświetleniu światłem nadfioletowym. W takich warunkach TiO_2 staje się zarówno silnym utleniaczem, jak i silnym reduktorem, pokazując swoje „agresywne” oblicze, które jest przedmiotem szczegółowych badań Grupy Fotokatalizy z Wydziału Chemii UJ.

Aktywowany światłem dwutlenek tytanu może generować tak zwane reaktywne formy tlenu, czyli bardzo reaktywne i silnie utleniające cząsteczki oraz jony, które powstają w wyniku fotokatalitycznych reakcji zachodzących na powierzchni tego materiału. Reaktywne formy tlenu posiadają zdolność do utleniania materii organicznej, czyli wielu typowych zanieczyszczeń powietrza, wody i powierzchni. Co ważne, do zanieczyszczeń tych należą również zanieczyszczenia mikrobiologiczne, zatem fotoaktywny TiO_2 ma również właściwości antybakteryjne, antygrzybicze i antywirusowe. Te cechy dwutlenku tytanu pozwalają wykorzystać go do wytwarzania samoczyszczących oraz samosterylizujących się powłok. W dobie narażenia na zakażenia wirusowe i bakteryjne takie zalety TiO_2 przykuwają szczególną uwagę.

O właściwościach TiO_2 w dużej mierze decyduje jego struktura i morfologia – rozdrobnienie materiałów do skali nanometrycznej nie tylko ułatwia wytwarzanie trwałych powłok, ale również przyczynia się do większej aktywności fotokatalitycznej. Grupa Fotokatalizy opracowała skuteczne metody nanoszenia cienkich, przezroczystych warstw TiO_2 na różne podłoża – polimerowe, szklane czy metaliczne. Jako fotokatalizator dwutlenek tytanu wymaga aktywacji światłem ultrafioletowym, co ogranicza jego stosowanie w czystej postaci do powierzchni eksponowanych na bezpośrednie działanie światła słonecznego lub sztucznego światła UV. Dlatego też poszukiwane są metody pozwalające na rozszerzenie aktywności TiO_2 na światło widzialne, na przykład poprzez związanie z jego powierzchnią cząsteczek fotosensybilizatora (czyli uczulacza). Badacze opracowali kilka takich metod, z których jedna została skomercjalizowana (licencja zakupiona przez firmę In-PhoCat – Innovative Photocatalytic Solutions Sp. z o.o.). Zastosowanie nietoksycznych, neutralnych biologicznie cząsteczek fotosensybilizatora pozwala na otrzymanie materiałów fotodezynyfikujących do zastosowań okołomedycznych. Proste i tanie cząsteczki barwników mogą również działać jako aktywatory powierzchni pokrytej farbą na bazie TiO_2 , które choć z czasem ulegają degradacji, można z łatwością odtworzyć poprzez przemycie powierzchni roztworem świeżego fotosensybilizatora.

Praca naukowców skupia się na badaniach procesów fotokatalitycznych, opracowywaniu nowych materiałów i poszukiwaniu nowych metod fotosensybilizacji. Badane materiały bazują nie tylko na dwutlenku tytanu, ale również na innych półprzewodnikach. Otrzymywane fotokatalizatory wykorzystywane są do degradacji zanieczyszczeń organicznych i mikrobiologicznych, lecz testowane są również możliwości ich zastosowania w produkcji wodoru z wody, syntezie organicznej czy redukcji CO_2 , której efektem jest wytworzenie użytecznych związków organicznych.

Opracowane materiały stały się podstawą kilku zgłoszeń patentowych. Opatentowano między innymi metody wytwarzania aktywnych powłok fotokatalitycznych, sposób aktywacji takich powłok na światło widzialne, fotoaktywne płyny do czyszczenia soczewek kontaktowych oraz filtry UV o podwyższonym poziomie bezpieczeństwa do zastosowań w kremach do opalania i kosmetykach. Przeprowadzono prace wdrożeniowe dotyczące fotokatalitycznego systemu do usuwania niepożądanych zapachów z urządzeń chłodniczych.



Grupa Fotokatalizy (Wydział Chemii):

prof. Wojciech Macyk, dr Joanna Kunciewicz, dr Przemysław Łabuz, dr Marcin Kobielski, dr Taymaz Tabari, dr Mateusz Trochowski, dr Kaja Spilarewicz-Stanek.

Doktoranci: mgr Paweł Mikrut, mgr Agnieszka Jarosz-Duda, mgr Paulina O'Callaghan, mgr Kasidid Yaemsunthorn, mgr Kamil Urbanek, mgr Anna Jakimińska, mgr Krystian Mróz.

Studenci: Wiktoria Adamowicz, Magdalena Pilzak.

Współpraca WCh: prof. Grażyna Stochel, prof. Zbigniew Sojka, prof. Andrzej Kotarba, prof. Lucjan Chmielarz

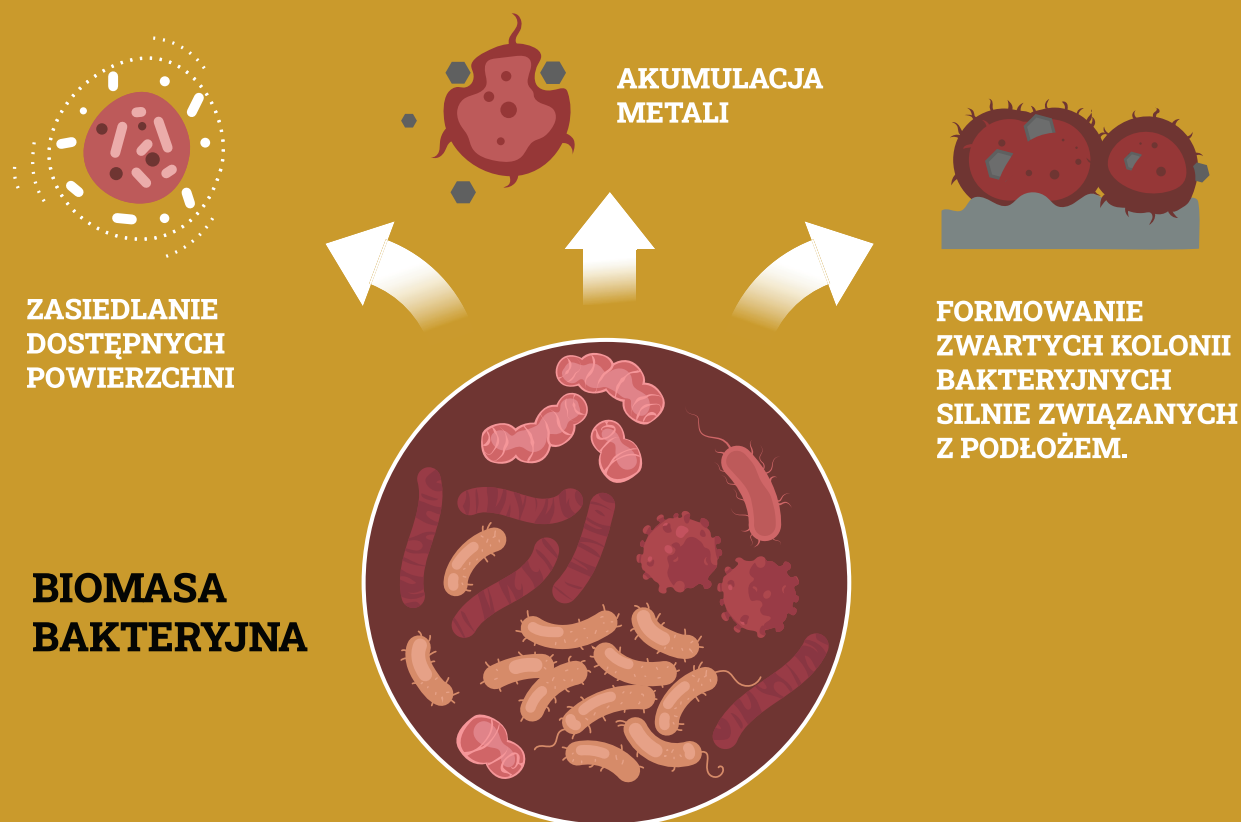
Projekty:

2× TEAM (FNP), 2× OPUS (NCN), SHENG (NCN), Solar-Driven Chemistry (NCN), 2× SONATA (NCN), PRELUDE (NCN)

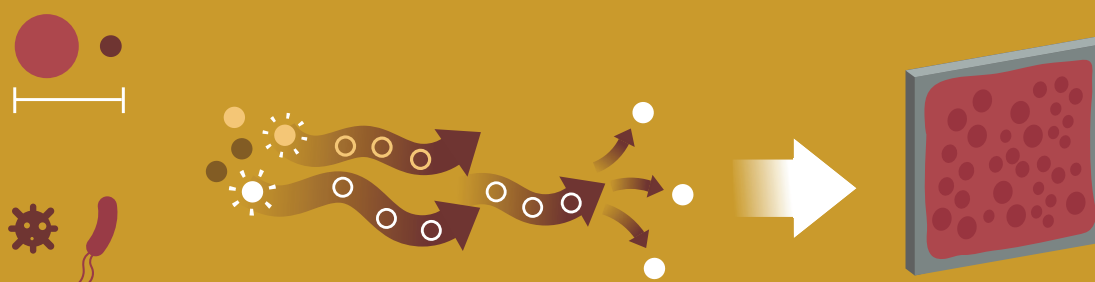
Lista projektów i publikacji Grupy Fotokatalizy na stronie:

<http://fotokataliza.pl>

WYKORZYSTANIE WŁAŚCIWOŚCI BAKTERII



BAKTERIE O RÓŻNYCH ROZMIARACH, MORFOLOGII I ŁADUNKU POWIERZCHNIOWYM PEŁNIĄ FUNKCJĘ BIONOŚNIKA



**MAŁI BUDOWNICZOWIE,
CZYLI JAK CHEMICY
WSPÓŁPRACUJĄ Z BAKTERIAMI**

Chociaż mikroświat od zawsze fascynował człowieka, istnienie bakterii odkryto dopiero w XVII stuleciu, a dwa wieki później dowiedziono ich działania chorobotwórczego. Dzisiaj znamy również jaśniejsze oblicze tych mikroorganizmów: dobroczynne szczepy bakterii występują w jogurtach, kiszonkach i probiotykach. Wykorzystujemy je przy usuwaniu zanieczyszczeń wód i gruntów czy przy produkcji czystych substancji chemicznych. Bakterie przychodzą również z pomocą chemikom zajmującym się syntezą nowych materiałów o interesujących właściwościach.

Bakterie stanowią niezwykle różnorodne królestwo mikroorganizmów posiadających szereg specyficznych cech: określoną strukturę, morfologię czy ładunek zgromadzony na zewnątrz ścian komórkowych, umożliwiając ich wykorzystanie w nieoczywisty sposób. Wśród interesujących właściwości należy wspomnieć o zdolności bakterii do zasiedlania dostępnych powierzchni (zjawisko tak zwanego „wyscigu o powierzchnię”), akumulacji metali oraz formowania zwartych kolonii bakteryjnych silnie związanych z podłożem. Te cechy stały się inspiracją do zastosowania bakterii w syntezie nowoczesnych nanomateriałów funkcjonalnych, takich jak katalizatory strukturalne oraz materiały elektrodowe.

Szeroki wachlarz możliwości aplikacyjnych materiałów zawierających funkcjonalne nanocząstki przyczynił się do wzrostu ich popularności. Niemniej jednak syntezy takich struktur są wieloetapowe i na ogół wymagają wykorzystania szkodliwych dla środowiska reagentów. Ponadto jednym z większych wyzwań podczas syntezy nowoczesnych materiałów w skali technicznej jest uzyskiwanie jednorodnego rozproszenia fazy aktywnej (czyli

składnika, który nadaje materiałowi specyficzne właściwości; takimi składnikami mogą być nanocząstki metali lub ich tlenki) w całej objętości porowatego nośnika.

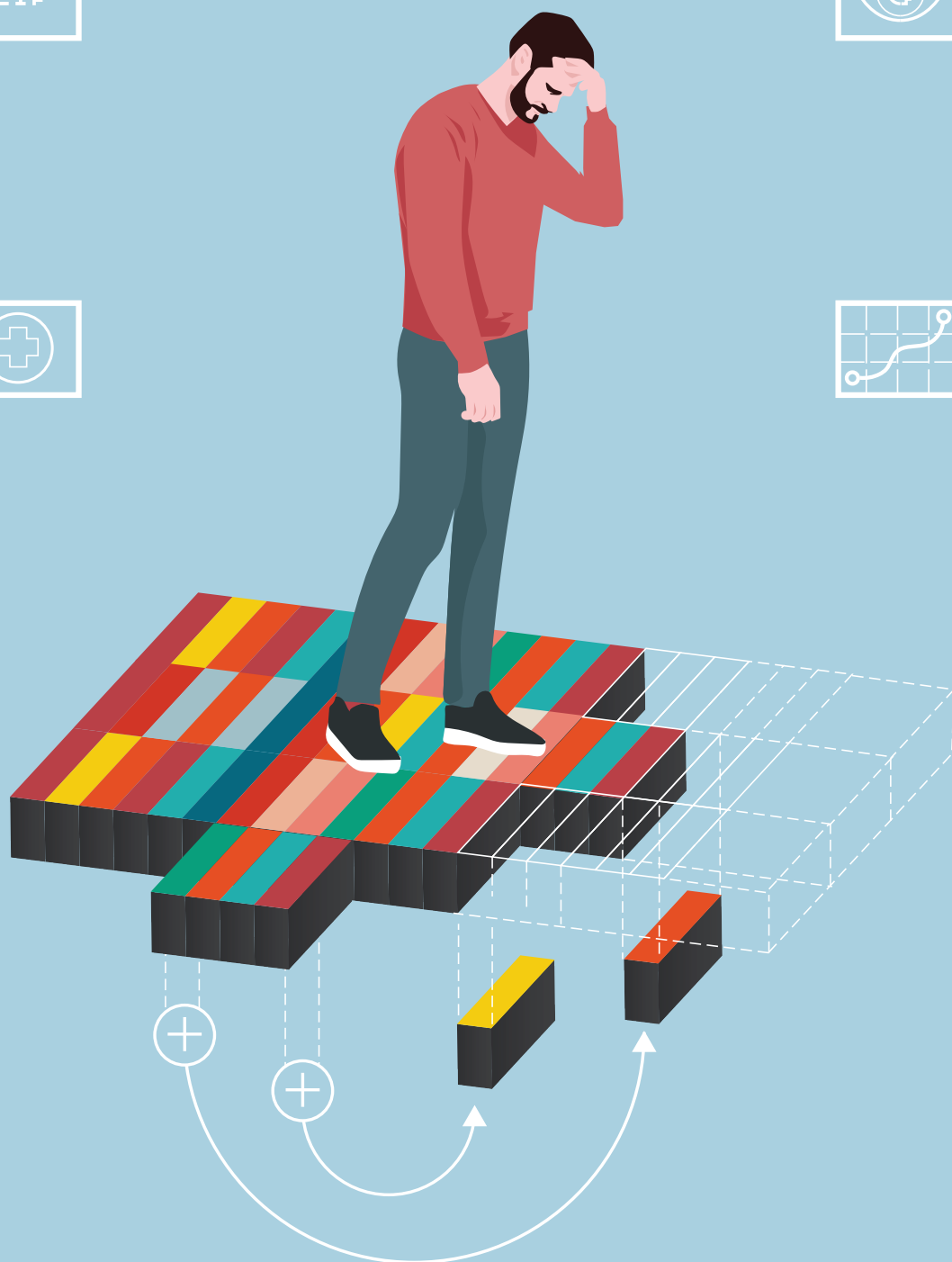
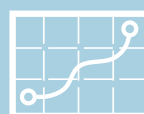
Odpowiedzią na ten problem stanowi nowatorski sposób wytwarzania materiałów na bazie biomasy bakteryjnej. W tym celu naukowcy zastosowali bakterie o różnych rozmiarach, morfologii i ładunku powierzchniowym, które pełnią tutaj funkcję bionośnika zdolnego do efektywnego wychwytywania, transportu i kontrolowanej dyspersji nanocząstek metali oraz tlenków metali na powierzchniach różnych nośników (takich jak węgiel porowaty, tlenek glinu, tlenek cyrkonu). Dzięki małym budowniczym otrzymywane są materiały o wysokim stopniu rozproszenia na powierzchni, stabilizacji nanocząstek, a w przypadku materiałów elektrodowych – charakteryzujące się przewodnictwem elektrycznym.

Zaprezentowany kierunek badań jest rozwijany w Grupie Chemii Powierzchni i Materiałów na Wydziale Chemii UJ pod kierownictwem prof. dr. hab. Andrzeja Kotarby.





?



**APROKSYMACJA
I INTERPOLACJA
UŻYTECZNE NA CO DZIEŃ?**

Matematycy zajmujący się teorią aproksymacji i interpolacji opracowują oraz badają szybkie metody przybliżania obiektów skomplikowanych prostszymi elementami. Badając elementy z sąsiedztwa obiektu, można zdobyć informacje o samym obiekcie. Brzmi abstrakcyjnie? Niewykluczone, że tak, ale właśnie w ten sposób aproksymacja i interpolacja pomagają nam w życiu codziennym. Jak można to sobie lepiej wyobrazić?

Zgodnie z przysłowiem **niedaleko pada jabłko od jabłoni**, badając owoce leżące pod drzewem, można wiele wywnioskować o samym drzewie: określić jego gatunek, wielkość, nasłonecznienie, nawodnienie, wiek itd. Jeszcze trafniej tę koncepcję opisuje powiedzenie **pokaż mi swój pokój, a powiem ci, kim jesteś**. Ta zasada obowiązuje też w pewnych obszarach matematyki, zwłaszcza w aproksymacji. Własności wielomianów znajdujących się w pobliżu badanej funkcji pozwalają wnioskować o jej cechach. Analogicznie można badać inne, bardziej skomplikowane struktury za pomocą prostszych elementów znajdujących się w ich sąsiedztwie. To zadanie aproksymacji.

A interpolacja? Jest to rodzaj aproksymacji, ale za jej pomocą przybliżamy funkcjami zbiory danych. Interpolacja pozwala przewidywać, jakie wartości pojawią się tam, gdzie danych (jeszcze) brak. Jej ważną rolę w naszym świecie widać na przykład w czasie pandemii, bo wykorzystując interpolację, możemy przewidywać liczbę nowych zarażeń wirusem w najbliższych dniach, gdy znamy liczbę zarażeń z poprzednich. Przewidywanie jest tym dokładniejsze, im więcej informacji (czyli danych) posiadamy.

Aproksymacja i interpolacja pozwalają także przybliżać gładkimi liniami skomplikowane zbiory. Dzięki temu możemy odzyskać częściowo utracone dane, odtwarzać skompresowane obrazy i poprawiać ich jakość – „wyostrzyć” je. Zatem metody aproksymacji są potężnym narzędziem wykorzystywanym na przykład do kompresowania i przesyłania obrazów oraz danych pomiarowych

(np. spektroskopowych), co oznacza, że – nie zdając sobie z tego sprawy – korzystamy z nich na co dzień w smartfonach i wielu innych urządzeniach elektronicznych.

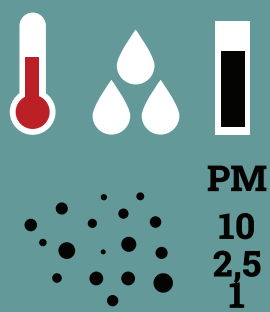
Twierdzenia aproksymacji i interpolacji znajdują także konkretne zastosowanie w medycynie, na przykład w *Magnetic Particle Imaging* (MPI) – w testach diagnostycznych medycyny klinicznej. Dzięki nim możliwe są procedury rekonstrukcji, jak również automatyczne porównywanie obrazów MPI, na przykład zdjęć chorego i zdrowego narządu. Ułatwia to lekarzom postawienie właściwej diagnozy lub pokazuje poprawę, jaka dokonała się w trakcie leczenia pacjenta.

Pozornie niewielkie odkrycie w dziedzinie interpolacji lub aproksymacji może spowodować widoczny postęp w rozwoju technologii. Programy komputerowe rozwiązujące równania różniczkowe obliczają jedynie rozwiązanie przybliżone, aproksymując wartości rozwiązania dokładnego. Aby odpowiedzieć na pytanie, jak daleko od znalezionej numerycznie rozwiązania znajduje się rozwiązanie dokładne, musimy oszacować błąd aproksymacji – rozwiązanie przybliżone jest tym lepsze, im mniejszy jest błąd aproksymacji. Z jednej strony są to ciekawe i subtelne zagadnienia matematyczne, a z drugiej – mają ogromne znaczenie w kontekście konkretnych technologii, z których wszyscy korzystamy. Na przykład lepsze oszacowania stałych w nierównościach wielomianowych typu Markowa pozwalają na udoskonalenie technologii GPS: w efekcie otrzymujemy szybsze i dokładniejsze przybliżanie danych, a to oznacza bardziej precyzyjną lokalizację obiektów.

i

dr hab. Leokadia Białas-Cieź, prof. UJ jest kierownikiem dwóch grantów NCN: 2017/25/B/ST1/00906 „Konstruktywna aproksymacja na zbiorach algebraicznych” (wykonawcy: prof. Mirosław Baran, dr Tomasz Beberok, dr Agnieszka Kowalska) i 2019/35/O/ST1/02245 „Wybrane węzły interpolacji w aproksymacji wielomianowej” (wykonawca: mgr Dimitri Jordan Kenne).

STACJA POMIAROWA



SIEĆ STACJI



APLIKACJA
MONITORUJĄCA

MAPY JAKOŚCI
POWIETRZA



raporty roczne dotyczące
jakość powietrza



ODDYCHAĆ
NA ZIELONO

Uniwersytecka bezprzewodowa sieć stacji do monitorowania jakości powietrza oraz warunków atmosferycznych Storm&DustNet to projekt realizowany w Instytucie Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie. Wszystko po to, aby oddychać zdrowiej.

W 2019 roku w Polsce z powodu zanieczyszczonego powietrza zmarło 40 tysięcy osób (raport EEA *Air quality in Europe*). Świadomość społeczeństwa związana z tym wyzwaniem rośnie. Naukowcy z Uniwersytetu Jagiellońskiego od kilku lat starają się zbadać i zmierzyć, na jak duży smog narażeni są obecnie mieszkańcy mniejszych miejscowości (ekspozycja na smog) oraz czy z biegiem czasu widać jakieś zmiany w jakości powietrza.

Projekt obejmuje cztery działania: proces wykonywania pomiarów stężenia pyłu zawieszonego w powietrzu (PM), wizualizację wyników on-line (TymOddycham.uj.edu.pl), udział w edukacji społeczeństwa dotyczącej negatywnych skutków zdrowotnych wynikających z występowania wysokich stężeń PM oraz podnoszenie świadomości tego, że wysokie stężenia PM są bezpośrednim i mierzalnym efektem działalności człowieka. Jednym z elementów projektu jest współpraca z dwiema krakowskimi gminami, Kalwarią Zebrzydowską (12 lokalizacji) oraz Skawiną (10 lokalizacji). Łącznie pomiary prowadzone są w 22 punktach zlokalizowanych głównie na terenach szkół w poszczególnych sołectwach.

Uniwersyteckie stacje pomiarowe są niewielkimi urządzeniami (20×15×7 cm) wyposażonymi w kilka czujników, które mierzą stężenie pyłu zawieszonego w powietrzu (wskaźniki PM_{10} , $PM_{2.5}$, PM_1) oraz warunki atmosferyczne (temperatura, wilgotność, ciśnienie). Stacje wymagają

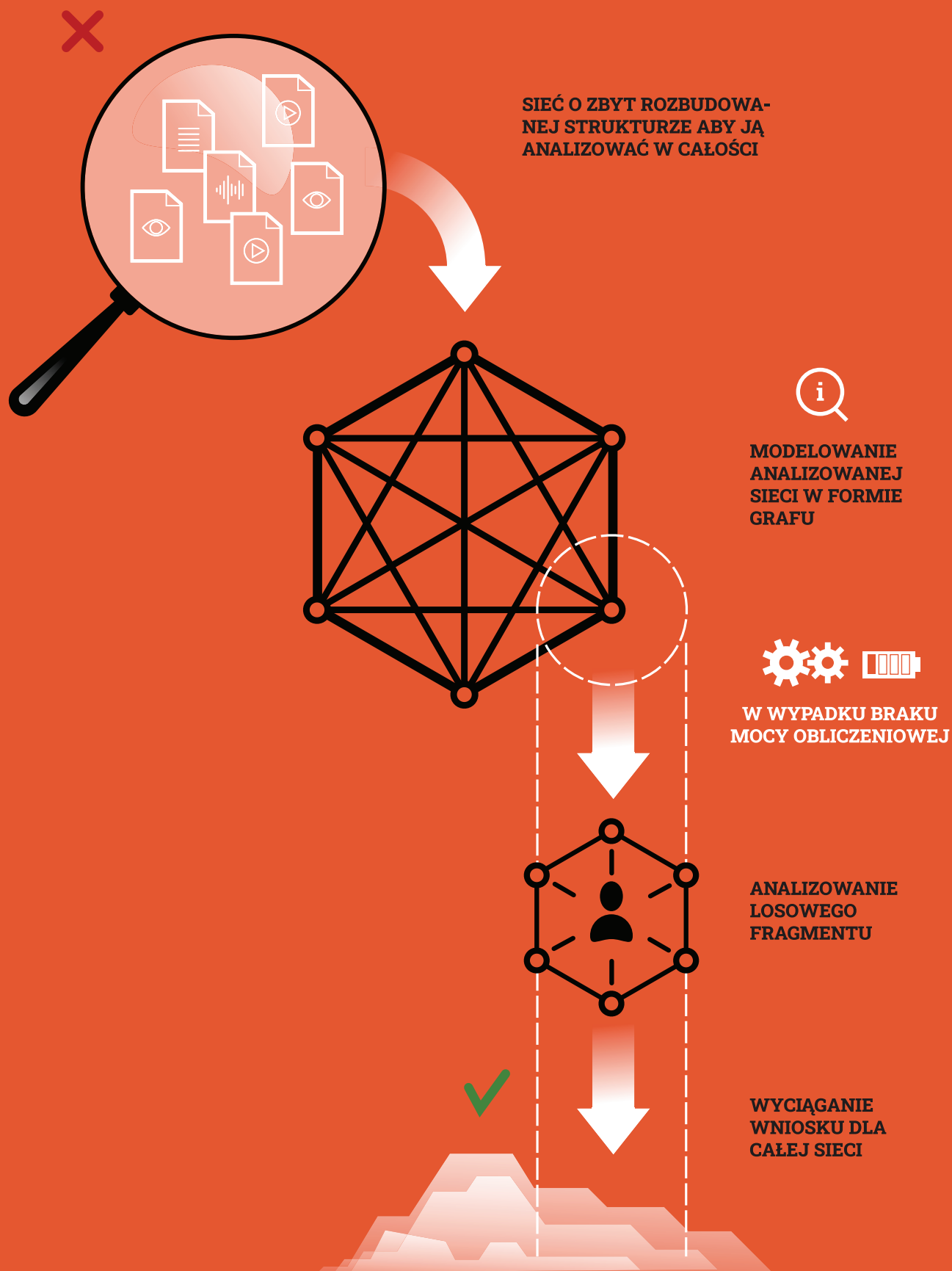
jedynie podłączenia do zasilania (pobór mocy wynosi 5W), a wyniki pomiarów przesyłane są bezprzewodowo do serwera danych poprzez modem GSM. Dzięki temu stacje można instalować w dowolnej lokalizacji.

Wyniki pomiarów stężenia pyłu zawieszonego są podstawą do przygotowania bieżącej mapy jakości powietrza, dostępnej on-line (TymOddycham.uj.edu.pl) bez ograniczeń. Ponadto rokrocznie przygotowywane jest opracowanie podsumowujące jakość powietrza w poszczególnych lokalizacjach. Pozwala to na ocenę długookresowych zmian jakości powietrza, a w szczególności ocenę efektów programów wymiany pieców i ograniczenia niskiej emisji realizowanych w poszczególnych gminach.

W przyszłości stacje pracujące w ramach projektu Storm & DustNet będą doposażone w dodatkowe czujniki środowiskowe umożliwiające detekcję między innymi odorów oraz lotnych związków organicznych. Ten aspekt pomiarów środowiskowych wydaje się szczególnie interesujący dla społeczności mieszkających w sąsiedztwie stref aktywności gospodarczej. Co więcej, planowane jest wyposażenie stacji pomiarowych w niewielkie detektory wyładowań atmosferycznych. Pozwolą one na monitorowanie lokalnej aktywności burzowej oraz ocenę intensywności zjawisk elektrycznych w atmosferze.

**i**

dr hab. inż. Zenon Nieckarz, prof. UJ
Zakład Doświadczalnej Fizyki Komputerowej
Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego
WFAIS UJ
<http://tymoddycham.uj.edu.pl>



**DUŻE SIECI
I JAK JE ANALIZOWAĆ**

Wyobraźmy sobie sieć połączeń osób na portalu Facebook albo sieć telefonów komórkowych podłączonych do Internetu. Wielkość takich struktur jest ogromna. Nie można ich ani przeglądać w całości, ani wykonywać na nich obliczeń (np. prędkości rozchodzenia się informacji). Jak więc sobie radzić z tak wielkimi tworami? Odpowiedzi należy szukać w teorii grafów.

Wiele obiektów i zjawisk spotykanych w życiu można modelować, używając tak zwanego grafu, czyli zbioru wierzchołków, spośród których niektóre połączone są krawędzią. Grafem możemy modelować na przykład sieć połączeń drogowych pomiędzy miastami lub sieć Facebook, uznając osoby za wierzchołki i ustanawiając krawędź między tymi osobami, które się znają. Na otrzymanym grafie można używać metod matematycznych pozwalających na łatwiejszą analizę własności wyjściowej sieci oraz efektywniejsze tworzenie algorytmów. Dzięki temu można uzyskać konkretne potrzebne informacje, na przykład znaleźć najkrótszą trasę czy zbadać tempo rozprzestrzeniania się wiadomości w sieci społecznościowej.

Duże sieci w kawałkach

Zdarza się jednak, że sieć jest za duża, by móc analizować ją w całości. Tak się dzieje chociażby w przypadku połączeń między profilami na Facebooku czy sieci linków między stronami w internecie – utworzony wówczas graf jest ogromny. Jak wybrnąć z takiej sytuacji? Cóż, można na przykład ograniczyć się do „oglądania” jedynie niewielkich fragmentów tej sieci (np. połączeń pomiędzy znajomymi losowej osoby na Facebooku). Idea, by właśnie na podstawie takich małych losowych części grafu wyciągać wnioski o całej sieci, była główną motywacją badań prowadzonych kilkanaście lat temu w Microsoft Research. W ich ramach Borgs, Chayes, Lovász, Sós i Vesztegombi opracowali teorię tak zwanych granic grafowych. Aby nie wchodzić zbyt głęboko w jej szczegóły, można powiedzieć, że ci badacze zdefiniowali, co to znaczy, że ciąg coraz większych grafów jest zbieżny do granicy, a także przedstawili obiekt graniczny takiego ciągu. Taka granica grafowa może być łatwo analizowana przy pomocy znanych narzędzi matematycznych, a wiele jej cech bardzo dobrze przybliża własności dużych grafów.

Teoria grafów ekstremalnych

Okazuje się, że granice grafowe nie tylko nadają się do analizy dużych sieci, ale są także niezwykle przydatnym narzędziem w tak zwanej teorii grafów ekstremalnych. Jest to dział teorii grafów zajmujący się szukaniem minimalnych i maksymalnych wartości różnych parametrów grafowych wśród sieci, które spełniają wymagane własności. Przykładowo, już ponad 100 lat temu wyznaczono, ile krawędzi może mieć graf na ustalonej liczbie wierzchołków, który nie ma trójkątów. Co ciekawe, bardzo podobne pytanie – ile pięciokątów może mieć graf, który nie ma trójkątów – pozostawało bez odpowiedzi przez ponad ćwierć wieku. Problem ten został rozwiązany dopiero niedawno, właśnie dzięki użyciu granic grafowych, przez dr. Andrzeja Grzesika z Wydziału Matematyki i Informatyki UJ oraz, niezależnie, przez zespół zagranicznych naukowców (Hatami, Hladký, Král', Norine i Razborov). Użycie granic grafowych pozwoliło zredukować to pytanie do problemu, który dzisiaj można łatwo i szybko rozwiązać przy użyciu komputera.

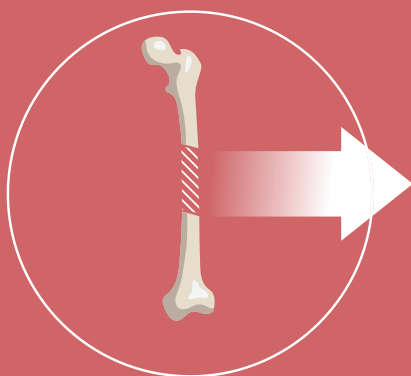
Patrząc w przyszłość

W ostatnich latach metody dowodowe oparte na granicach grafowych zostały mocno rozwinięte i przyczyniły się do niesamowitego postępu nie tylko w teorii grafów ekstremalnych oraz w badaniu dużych sieci, ale także w fizyce statystycznej czy analizie danych. Dlatego istotne jest głębsze zbadanie i rozwijanie teorii granic grafowych, a także metod na nich bazujących. Jak to zazwyczaj bywa z nowymi technikami – wciąż nie wiemy jeszcze, jakie są ich ograniczenia oraz jak szerokie mogą mieć zastosowania.

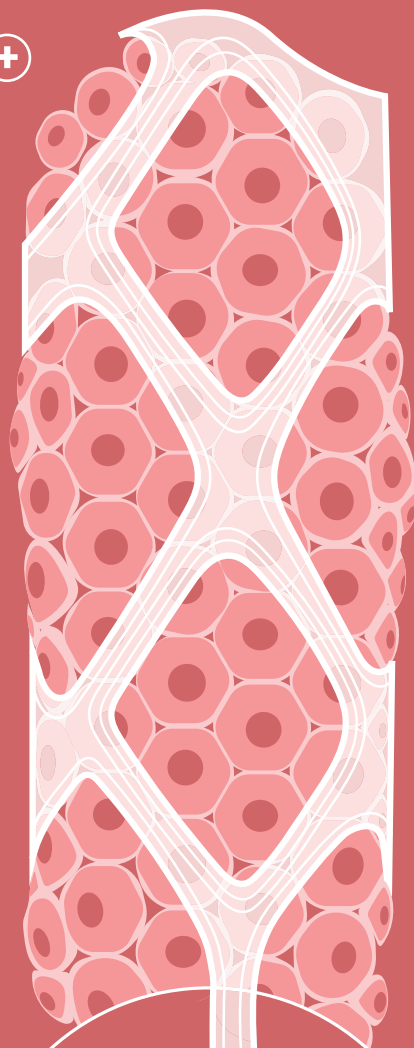
i

Na badania dotyczące zagadnienia granic grafowych Daniel Král' otrzymał prestiżowy grant naukowy Europejskiej Rady ds. Badań Naukowych. Grant ten jest realizowany na Uniwersytecie Masaryka w Brnie, University of Warwick oraz Uniwersytecie Jagiellońskim. W jego ramach Andrzej Grzesik z UJ wraz z zagranicznymi współpracownikami rozwijają teorię granic grafowych, dowodzą hipotez dotyczących teorii grafów ekstremalnych oraz tworzą nowe algorytmy dla dużych sieci. Rozstrzygnęli zwłaszcza istotną hipotezę László Lovásza, jednego z twórców tej teorii i laureata tegorocznej Nagrody Abela – najbardziej prestiżowej nagrody matematycznej.

REGENERACJA
TKANKI W MIEJSCU
UBYTKU



+



MACIERZ
ZEWNĄTRKOMÓRKOWA
(SZKIELET ODBUDOWY)

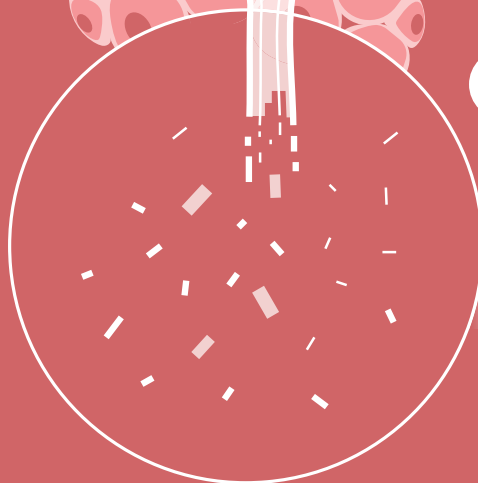
KOMÓRKI
MACIERZYSTE



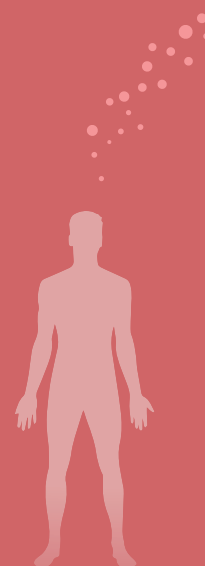
BIOZGODNOŚĆ
Z KOMÓRKAMI
ORGANIZMU



BIODEGRADACJA
SZKIELETU



↓



WYDALANIE
Z ORGANIZMU

|| ZNIKAJĄCE IMPLANTY – BADANIE
BIOZGODNOŚCI BIOMATERIAŁÓW

Inżynieria tkankowa to interdyscyplinarna, szybko rozwijająca się dziedzina badań, która zajmuje się przede wszystkim projektowaniem zamienników uszkodzonych tkanek organizmu. Wyodrębniła się ona w odpowiedzi na ogromną liczbę ograniczeń konwencjonalnych procedur transplantacyjnych, między innymi niską dostępność organów oraz wysokie ryzyko odrzucenia przeszczepu przez układ immunologiczny pacjenta.

Aktualnie jednym z najważniejszych wyzwań inżynierii tkankowej jest zaprojektowanie materiału, który byłby rusztowaniem wspierającym wzrost i różnicowanie się komórek macierzystych organizmu (zachowywałby się więc wewnątrz ludzkiego organizmu jak tak zwana natywna macierz zewnątrzkomórkowa). Taka funkcja mogłaby prowadzić do regeneracji tkanki w miejscu jej ubytku. Co ciekawe, jednym z warunków stawianych przez naukowców wspomnianemu materiałowi jest odpowiedni czas jego biodegradacji – rusztowanie takie miałyby wspierać regenerację tkanki do momentu, aż byłaby ona w stanie istnieć samoistnie. Wtedy to niepotrzebny już biomateriał ulegałby biodegradacji i byłby wydalany z organizmu.

Powstaje więc pytanie: czy inżynieria tkankowa jest blisko zaprojektowania idealnego materiału? Z czym zmagają się najmocniej w osiągnięciu tego celu? Otóż okazuje się, że pomimo wielu lat pracy naukowców z całego świata jesteśmy jeszcze bardzo daleko od tego, aby taka metoda leczenia ubytków tkanek stała się standardową procedurą. Wbrew pozorom, największym problemem nie jest zdefiniowanie biomateriału o odpowiednim czasie degradacji i odpowiedniej wytrzymałości. Większą trudność sprawia bowiem wyprodukowanie materiału o optymalnej biogodności z komórkami organizmu przy zachowaniu pozostałych właściwości (mechanicznych, porowatości, biodegradowalności) na odpowiednim poziomie. Z tego powodu bardzo ważne jest, aby biogodność proponowanego materiału określić możliwie szybko, a znając odpowiedź komórkową, ulepszać jego kompozycję.

Zespół Spektroskopii Oscylacyjnej z Wydziału Chemii UJ od wielu lat zajmuje się rozpoznaniem nanokompozytów polimerowych do zastosowań w inżynierii tkankowej kości. Matrycą takich kompozytów są polimery, np. polikaprolakton (PCL), a dla poprawy biokompatybilności jest on funkcjonalizowany poprzez wprowadzanie do polimeru specjalnych nanododatków, między innymi nanorurek oraz nanowłókien węglowych, pochodnych grafenu, a także nanocząstek magnetycznych. Jednak komponowanie wyżej wspomnianych materiałów nie jest głównym zadaniem badaczy z Zespołu Spektroskopii Oscylacyjnej. Wyzwanie, jakie sobie postawili, to zaproponowanie metody testów biogodności takich nanokompozytów. Prawdopodobnie pierwszą myślą

większości czytelników byłoby wysianie modelowych komórek kostnych na powierzchni proponowanego materiału i obserwacja ich rozwoju. Brawo! Mielibyscie rację, przynajmniej po części, bo sama obserwacja to za mało. Zespół Spektroskopii Oscylacyjnej w swoich badaniach nad biogodnością nanokompozytów posunął się nieco dalej – podczas kolejnych dni hodowli komórkowej badano „samopoczucie” komórek na powierzchni materiału. Wybrano nowoczesne narzędzie analityczne, jakim jest spektroskopia Ramana. Pomiary polegały na działaniu na próbkę materiału z wysianymi komórkami światłem lasera i rejestrowaniu odpowiedzi badanego układu w postaci rozproszonego światła. Otrzymane widmo spektroskopowe (zależność intensywności rozproszonych fotonów od ich energii) zawiera zaszyfrowaną informację o połączeniach atomów w układzie oraz ich wzajemnych oddziaływaniach. Spektroskopia Ramana to świetna metoda badania struktury molekularnej bliskiego zasięgu oddziałujących układów. Porównując ze sobą widma otrzymane w kolejnych dniach hodowli metodą dwuwymiarowej ramanowskiej analizy korelacyjnej (2D), można wyśledzić pojawianie się lub zanikanie oddziaływań na poziomie molekularnym oraz ich wzajemne sprzężenia. Pozwala to na scharakteryzowanie oddziaływania materiału z komórkami we wczesnej fazie ich rozwoju, a przede wszystkim na określenie wpływu nanododatków wprowadzanych do matrycy polimerowej na odpowiedź komórkową.

Podsumowując, spektroskopia Ramana przedstawia interesującą, nowoczesną metodę do szybkiej oceny biogodności materiałów do zastosowań w inżynierii tkankowej.

i

dr Anna Kołodziej¹, prof. dr hab. Aleksandra Wesełucha-Birczyńska¹, mgr Małgorzata Świętek², dr Łukasz Skalniak¹, prof. dr hab. inż. Marta Błażewicz³

¹ Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie, Polska

² Instytut Chemii Makromolekularnej Czeskiej Akademii Nauk w Pradze, Czechy

³ Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie, Polska

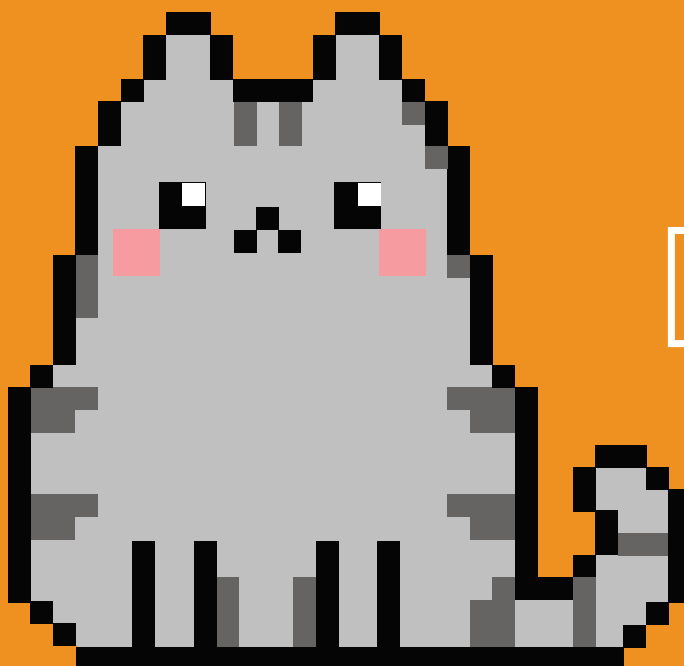
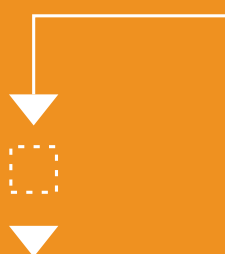
Finansowanie:

Decyzja Narodowego Centrum Nauki: 2013/09/B/ST8/00146.

Anna Kołodziej otrzymała częściowe wsparcie z Europejskiego Projektu POWR.03.02.00e00-I004/16.

1 sek 2 mb

KOMPRESJA DANYCH



PRZETWORZENIE PLIKÓW
W CIĄG SYMBOLI

IM CZĘŚCIEJ POJAWIA SIĘ DANY
SYMBOL TYM MNIEJ ZAWIERA BITÓW

	→	A	→	10 KB	
	→	B	→	20 KB	
	→	C	→	0 KB	
	→	D	→	40 KB	
	→	E	→	30 KB	

KODOWANIE ANS

3 x MNIEJSZE
I WYDAJNIEJSZE



0PG XL



30 x SZYBSZE

KODOWANIE ANS
REWOLUCJONIZUJE
WIRTUALNY ŚWIAT

Kodowanie ANS jest dzisiaj jednym z fundamentów wirtualnego świata. Tę metodę kompresji plików zaproponował i opracował dr Jarosław Duda z Wydziału Matematyki i Informatyki UJ. Dzięki niej szybkość oraz efektywność przepływu elektronicznych informacji wzrosła aż trzydziestokrotnie. Obecnie kodowanie to służy także nowemu formatowi plików graficznych – JPEG XL, który wprowadził jeszcze więcej udogodnień.

Produkcja elektronicznych danych jest zatrważająca. Liczba bajtów opływających nasz wirtualny świat sięga ponad 1 000 000 000 000 000 000 000 000 000! Statystycznie rzecz ujmując, każdy z nas wytwarza około 1,7 MB danych, czyli nieco więcej, niż jedną zapisaną dyskietkę (1,44 MB). W ciągu sekundy. Słynne słowa Billa Gatesa z 1981 roku („640 KB pamięci operacyjnej powinno każdemu wystarczyć”) mogą więc dzisiaj wywołać jedynie ironiczny uśmiech na twarzy. Oczywiście, aby poradzić sobie z tak gigantycznym ogromem informacji, w każdej chwili przemierzających z prędkością świata miliony dróg elektronicznych, trzeba było poszukać jakiegoś sposobu na to, aby usprawnić im ten niekończący się pęd. I tu właśnie z pomocą przyszła kompresja danych, która zaczęła „zmniejszać” je w taki sposób, aby mogły łatwiej i sprawniej wędrować po czeluściach wirtualnego świata.

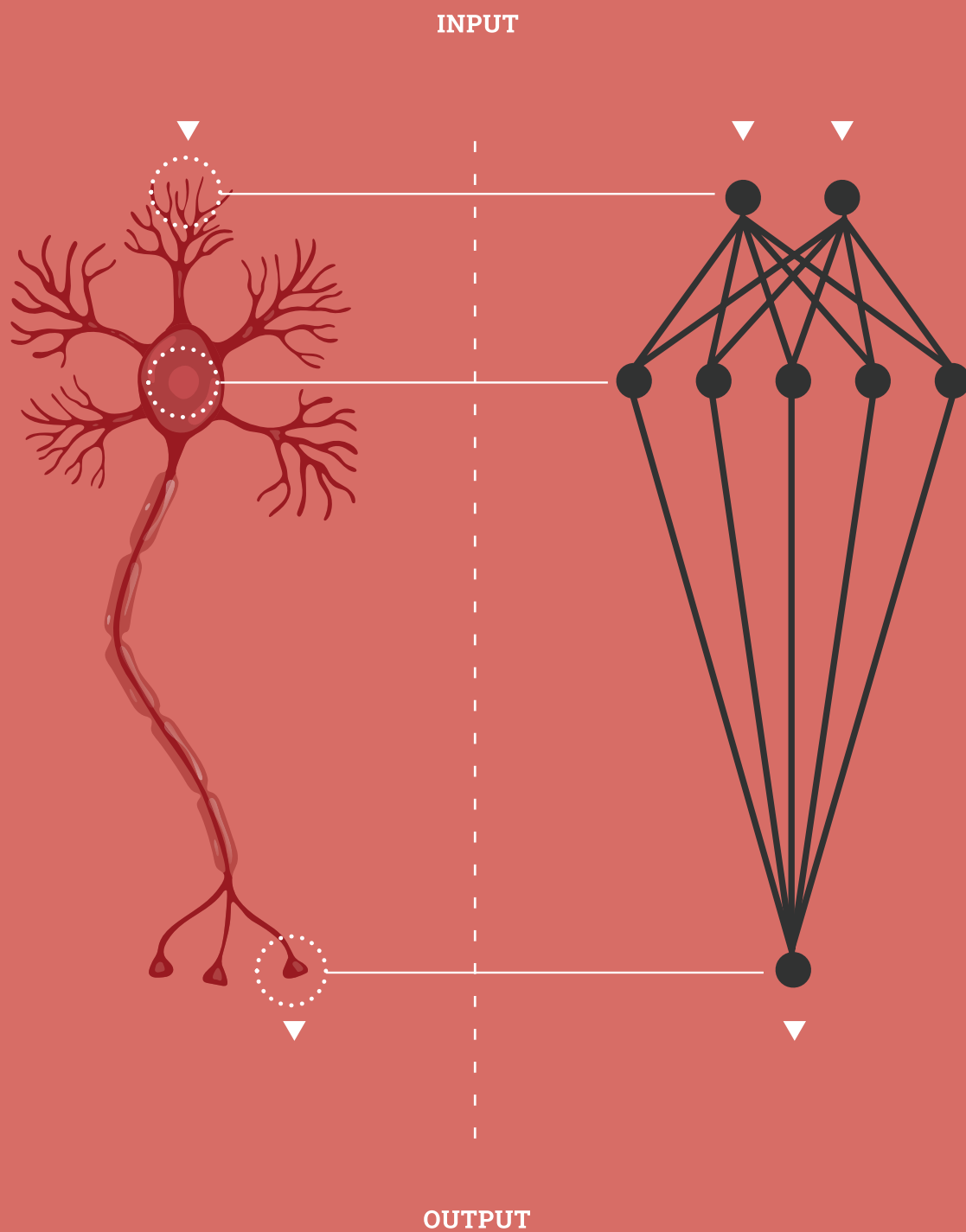
Kompresja danych to nic innego, jak wyodrębnienie konkretnej informacji z pliku, a następnie zapisanie jej w optymalny sposób. Wykorzystuje ona jeden zasadniczy fakt: rzadkie zdarzenia niosą więcej informacji niż te częstsze. Można to zilustrować na prostym przykładzie. Jeżeli ze specjalistycznej publikacji naukowej odejmiemy wszystkie konwencjonalne i występujące w potocznej mowie słowa, wówczas i tak zostanie nam całkiem sporo tekstu. Jeśli natomiast zrobimy dokładnie to samo z tabloidowym artykułem, ilość pozostałego tekstu będzie znacząco mniejsza. Zatem przetworzenie ciągu takich zdarzeń (lub – w przypadku kodowania – symboli) o zmiennej zawartości informacyjnej w jak najkrótszy ciąg bitów, czyli zer i jedynek, jest właśnie meritum kompresji oraz kompresorów danych.

Z biegiem czasu i wraz z rosnącą ilością produkowanych danych metody kompresji musiały stać się coraz bardziej zaawansowane. W światłowodach zaczęto wysyłać – zamiast całych bitów – ich ułamki (tzw. kodowanie arytmetyczne), które w znacznym stopniu zmniejszały wielkość binarnych pakietów. Co prawda zmniejszały także ich prędkość, jednak sam fakt tego, że pocięte dane były znacznie krótsze, sprawiał, że w tym samym momencie mogło poruszać się ich znacznie więcej. Oczywiście, jak nie trudno się domyślić, po kilku latach ułamkowe bity już nie wystarczały. Ilość przetwarzanych danych rosła bowiem w tempie wykładniczym, więc programiści musieli zacząć szukać nowych rozwiązań. Na ratunek łożącym się danym przyszło kodowanie ANS, obecnie coraz częściej zwane także „kodowaniem z UJ”, opracowane przez dr. Jarosława Dudę. Łącząc zalety obu poprzednich metod, a więc szybkości i stopnia kompresji, umożliwiło ono wirtualnym danym podróż, która jeszcze nigdy nie była tak szybka i tak sprawna – mogły one dostać się do końcowego przystanku nawet 30 razy szybciej, niż poprzednio. Dzisiaj polska metoda kodowania ratuje z opresji wielu internetowych gigantów (między innymi Facebooka, Apple’a, czy Google’a).

Innowacją, na którą wszyscy czekali, było pojawienie się nowego standardu kompresji plików opartego na „kodowaniu z UJ” – JPEG XL. Dzisiaj działa on już w trzech największych przeglądarkach internetowych, nawet trzykrotnie zmniejszając wielkości plików bez utraty ich jakości, umożliwiając sprawniejszą obsługę animacji oraz dając możliwość progresywnego kodowania (jeden plik dla różnych rozdzielczości). Polska metoda z UJ stała się więc motorem napędowym dla całego naszego wirtualnego świata.



dr Jarosław Duda – adiunkt w Instytucie Informatyki i Matematyki Komputerowej, wykładowca Uniwersytetu Jagiellońskiego. Jest twórcą metody kompresji danych zwanej „kodowaniem ANS” (z ang. Asymmetric Numeral Systems) lub „kodowaniem z UJ” stosowanej dziś we wszystkich urządzeniach elektronicznych. Polska metoda kodowania odmieniła oblicze całego wirtualnego świata, niedawno wprowadzając nowy format plików graficznych JPEG-XL (2020).



**BYĆ JAK MÓZG –
AI W DRODZE DO DOSKONAŁOŚCI**

Jak przezwyciężyć ograniczenia sztucznych sieci neuronowych? Czy mechanizmy obserwowane w mózgu człowieka mogą pomóc w ich ulepszeniu? Jak zaimplementować te mechanizmy w językach programowania? Na te i inne pytania starają się odpowiedzieć naukowcy interdyscyplinarnego zespołu działającego wspólnie na trzech wydziałach na Uniwersytecie Jagiellońskim: Wydziale Matematyki i Informatyki, Wydziale Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej oraz Wydziale Zarządzania i Komunikacji Społecznej.

Rozwój sztucznych sieci neuronowych, określany mianem kolejnej rewolucji przemysłowej, doprowadził do uzyskania przez sztuczną inteligencję wyższej od człowieka skuteczności w zadaniach polegających na rozpoznawaniu obrazów, co dodatkowo zwiększa popularność tej technologii.

Inspiracją powstania sztucznych sieci neuronowych były układy nerwowe obecne w mózgu czy siatkówce oka, które pozwalają człowiekowi rozwijać się i zdobywać nowe umiejętności. Z czasem sztuczne sieci coraz bardziej oddalały się od swoich biologicznych odpowiedników, stając się modelem czysto matematycznym. Z jednej strony obecnie stosowane sieci można uczyć szybko i efektywnie, ale z drugiej – wymagają one dostarczenia dużych ilości danych, mają problem z uczeniem się wielu zadań, a także trudno jest interpretować ich wyniki. Podobne problemy nie występują w mózgu, dlatego powstało pytanie: jakie mechanizmy pomagają zapobiec tym negatywnym efektom? Odpowiedź, nie możliwa do uzyskania w czasie powstawania sztucznych sieci neuronowych, wydaje się być w zasięgu ręki dzięki najnowocześniejszej technologii medycznej, pozwalającej na większy wgląd w działanie mózgu. Technologia, która umożliwia zrozumienie skomplikowanych mechanizmów zachodzących w mózgu i aplikację tej wiedzy do sztucznych sieci neuronowych w celu eliminacji wielu z dotychczasowych ograniczeń, występujących w klasycznym uczeniu maszynowym.

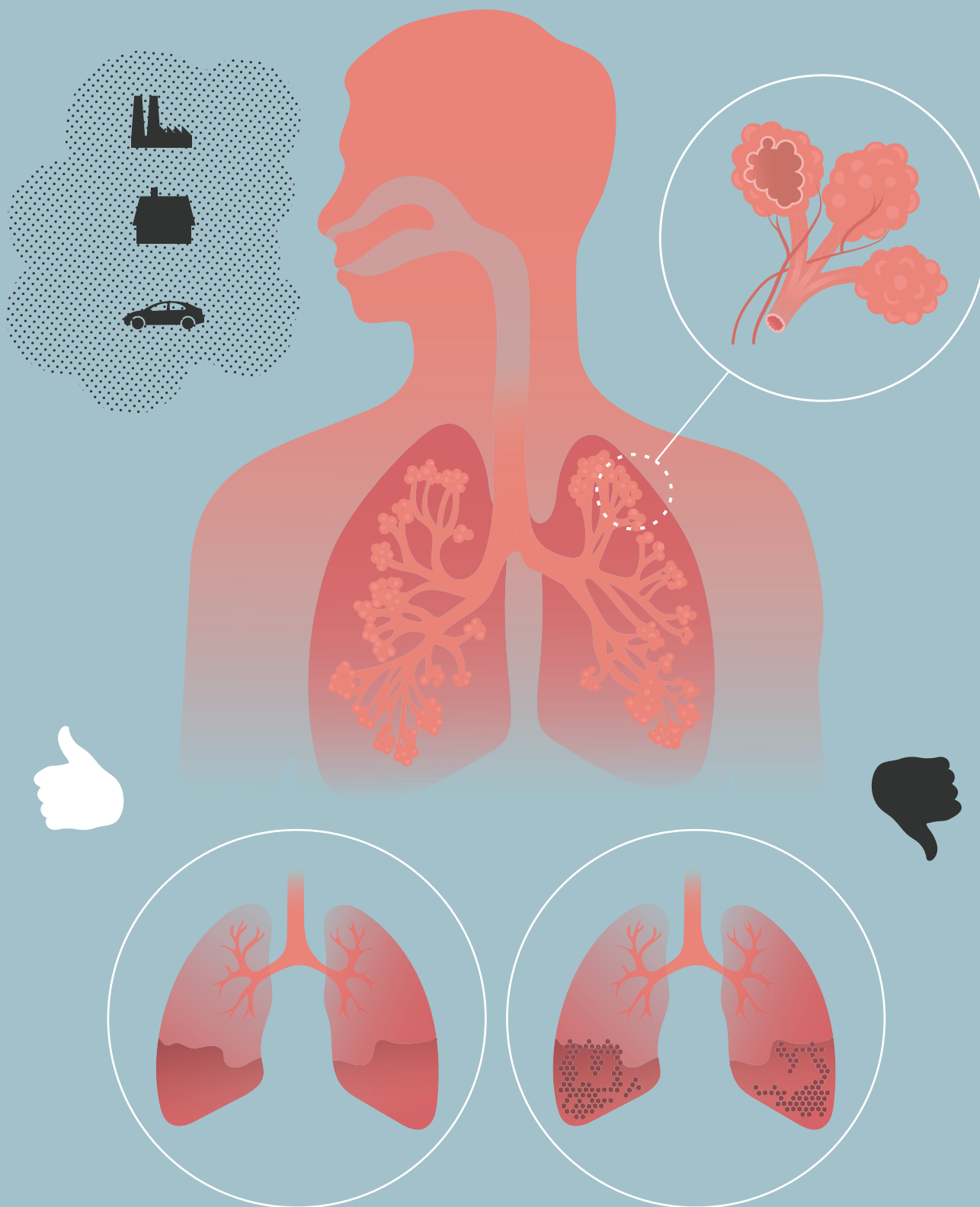
Głównym celem projektu jest wykorzystanie naturalnych mechanizmów biologicznych do budowy modeli, które radzą sobie z aktualnymi słabościami sztucznych

sieci neuronowych. Przykładem jest katastroficzne zapomnienie (ang. *catastrophic forgetting*), czyli tendencja do całkowitego i nagłego zapomnienia wcześniej poznanych informacji po zdobyciu nowej wiedzy. Kolejnym problemem jest czarnoskrzynkowy charakter sztucznych sieci neuronowych, który oznacza, iż pomimo tego, że te sieci potrafią dawać wyniki przewyższające możliwości człowieka, tak naprawdę nie wiemy, dlaczego udzielają takich, a nie innych odpowiedzi, co znacznie ogranicza zaufanie do skonstruowanego modelu. Problem ten spowodował powstanie tak zwanej wyjaśnialnej sztucznej inteligencji (ang. *explainable artificial intelligence*), której celem oprócz podania rozwiązania jest zbudowanie odpowiedzi możliwej do zinterpretowania przez człowieka. Te i inne negatywne cechy niwelowane są poprzez zastosowanie mechanizmów zaobserwowanych w mózgu. W przypadku katastroficznego zapomnienia jest to odpowiednie reagowanie na zmniejszoną plastyczność neuronów, która nie pozwala na efektywne uczenie się nowych informacji. W przypadku interpretowalnej sztucznej inteligencji stosuje się między innymi prototypy korelujące z charakterystycznymi obiektami obserwowanymi na obrazie (prototypem dla problemu klasyfikacji ptaków może być na przykład czerwony dziób czy białe skrzydła).

Projekt realizowany na Wydziale Matematyki i Informatyki dotyczy zagadnień sztucznej inteligencji, jednakże wskazówek do rozwiązania problemów, z którymi mierzą się naukowcy pracujący w dziedzinie nauk ścisłych, udzielają nauki biologiczne. Naśladowanie szeroko pojętej natury ma szansę spowodować przełom w działaniu wyrafinowanej technologii.

i

Zespół, który pod kierownictwem prof. dr. hab. Jacka Tabora realizuje projekt „Inspirowane biologicznie sieci neuronowe”, podzielony jest na sześć grup badawczych (w jego prowadzenie zaangażowani są także prof. dr hab. Maciej Nowak z Wydziału Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UJ oraz prof. dr hab. Tadeusz Marek z Wydziału Zarządzania i Komunikacji Społecznej UJ). Projekt uzyskał finansowanie w konkursie TEAM-NET Fundacji na rzecz Nauki Polskiej.



**O PODŁOŻACH POLIMEROWYCH,
CZYLI JAK SKUTECZNIE WALCZYĆ
Z CHOROBAMI PŁUC**

Ciągły postęp cywilizacyjny i związany z nim rosnący poziom zanieczyszczenia powietrza (na przykład wszechobecny smog) sprawiają, że coraz więcej osób cierpi na choroby płuc. Prócz najczęstszych, takich jak przewlekła obturacyjna choroba płuc czy astma, w ostatnich latach rośnie również liczba chorych na choroby śródmiąższowe płuc (w skrócie ILD, z ang. *interstitial lung diseases*). Jest to duża grupa chorób, których rozpoznanie stanowi nieraz wyzwanie kliniczne z powodu braku jednoznacznych metod diagnostycznych. Specjaliści z Zakładu Biofizyki Molekularnej i Międzyfazowej (WFAiS) we współpracy z Kliniką Pulmonologii CM UJ pracują nad metodami umożliwiającymi rozwiązanie tego problemu, co w efekcie może pozwolić na bardziej precyzyjną diagnostykę chorób śródmiąższowych płuc, a w konsekwencji skuteczniejsze i mniej kosztowne leczenie.

O tym, że smog bezpośrednio zagraża naszemu zdrowiu, powiedziano i napisano już wiele. Problem ten jest naprawdę poważny – nawet niewielkie cząstki zawieszone w zanieczyszczonym powietrzu mogą odkładać się w pęcherzyku płucnym, powodując liczne reakcje patologiczne.

Choroby śródmiąższowe płuc związane są najczęściej z obecnością zmian patologicznych w miąższu płuc, a także z zaburzeniami wentylacji układu oddechowego i z upośledzeniem wymiany gazowej. W wielu przypadkach dochodzi do nieodwracalnego uszkodzenia tkanki płucnej i rozwoju włóknienia płuc. Jedną z tego typu chorób jest idiopatyczne włóknienie płuc (IPF, z ang. *idiopathic pulmonary fibrosis*). W przypadku tej choroby etiologia nie została w pełni wyjaśniona. Badany jest wpływ zanieczyszczenia powietrza na rozwój IPF. Obecnie postuluje się, iż w wyniku uszkodzenia pęcherzyków płucnych dochodzi do rozwoju reakcji zapalnych i następnie do zaburzenia procesów gojenia tkanki płucnej, czego rezultatem jest postępujące włóknienie. W przestrzeni śródmiąższowej zaczynają gromadzić się komórki nazywane fibroblastami i miofibroblastami, a w płucach powstają blizny. Prowadzi to do trwałego uszkodzenia miąższu płucnego i rozwoju niewydolności oddechowej. W rezultacie zmiany te mogą przyczynić się do przedwczesnej śmierci – przeciętnie osoba chora na IPF przeżywa około 3–5 lat.

W walce ze śródmiąższowymi chorobami płuc nie ma łatwych rozwiązań. W tym przypadku bowiem najważniejsza jest prawidłowa identyfikacja schorzenia. Obecnie na podstawie danych klinicznych z wywiadu, obrazu radiologicznego, obrazu histopatologicznego i szeregu badań dodatkowych rozpoznania choroby dokonuje zespół multidyscyplinarny złożony z pulmonologą, radiologą i patomorfologą, a często również immunologą klinicznym. Problem jednak polega na tym,

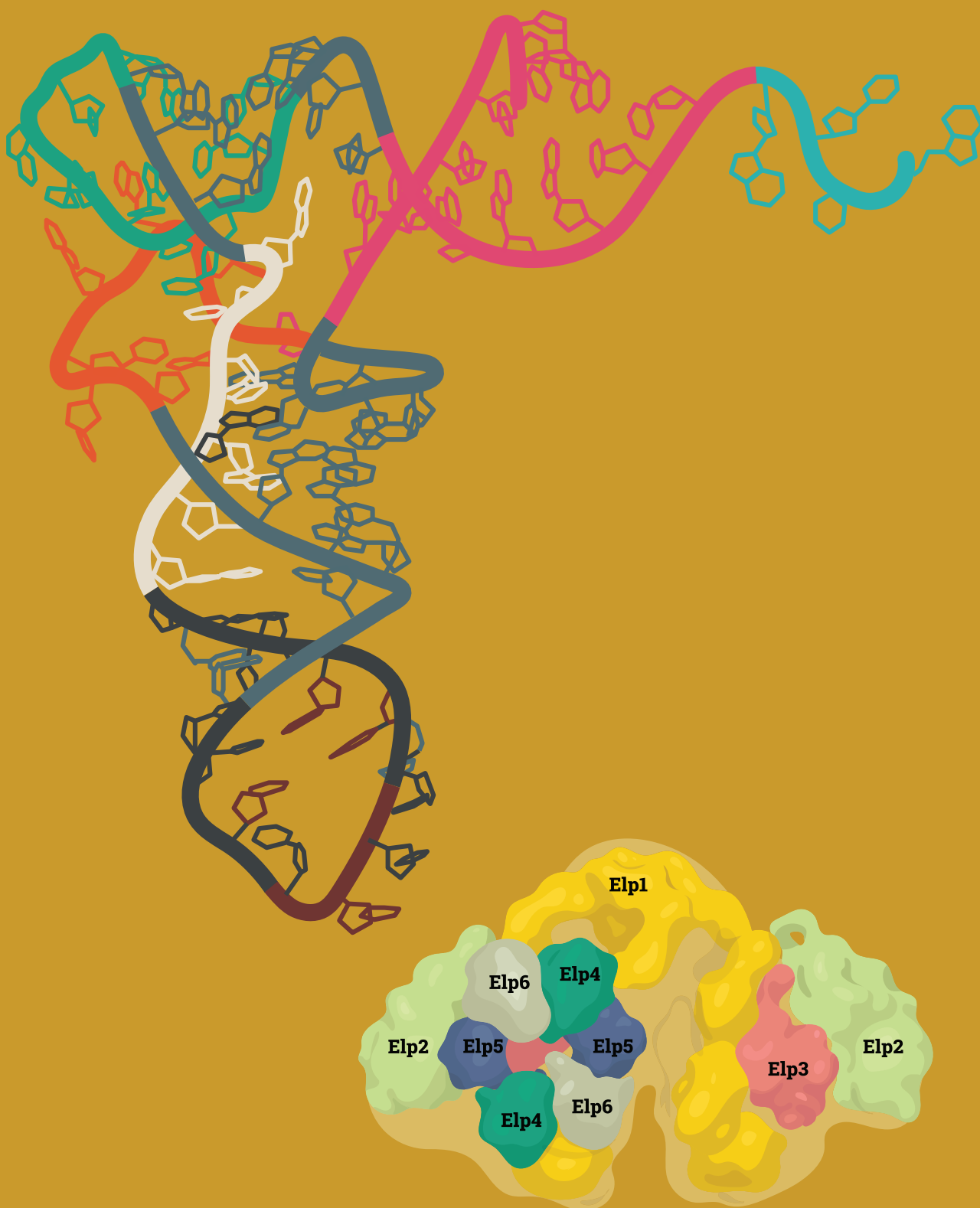
że w przypadku wielu jednostek chorobowych ILD obraz zmian patologicznych jest niejednoznaczny. Nierzadko zdarza się więc się, że choroba nie zostaje właściwie rozpoznana, a podejmowana terapia okazuje się nieskuteczna. Przykładami takich trudnych do rozróżnienia jednostek chorobowych są: wspomniane wcześniej IPF i niespecyficzne śródmiąższowe zapalenie płuc (NSIP, z ang. *nonspecific interstitial pneumonia*). Ich rozpoznanie jest dużym wyzwaniem, ponieważ obie choroby mogą mieć niezwykle podobny obraz kliniczny. Obecnie specjaliści zajmujący się tym tematem starają się opracować kompleksową metodę diagnostyczną, która pozwoliłaby w sposób jednoznaczny określić, z którą chorobą mamy do czynienia. W ten sposób właściwą terapię można by wdrożyć znacznie szybciej.

Z pomocą w rozwiązaniu tego problemu mogą przyjść badania prowadzone w Zakładzie Biofizyki Molekularnej i Międzyfazowej we współpracy z Kliniką Pulmonologii CM UJ. Ich celem jest stworzenie podłoża do hodowli fibroblastów płucnych o tak dobranych właściwościach mechanicznych i chemicznych, aby możliwe było sterowanie procesami przyłączania (adhezji) oraz rozmnażania (prolifracji) komórek, prowadzące do kontrolowanego wzmocnienia lub zahamowania wzrostu określonej linii komórkowej. Określenie zestawu parametrów pozwalających na jednoznaczne rozróżnienie fibroblastów pochodzących z chorób IPF i NSIP mogłoby stanowić podstawę nowej metody diagnostycznej, która pozwoliłaby na szybką, skuteczną i mniej niż obecnie kosztowną diagnostykę osób cierpiących na te choroby.

i

dr hab. Joanna Raczkowska, dr hab. Kamil Awsiuk, dr Tomasz Stachura

Badania finansowane przez NCN w ramach projektu OPUS 13 (UMO-017/25/B/ST5/00575).



**O BADANIU
SYNTEZY BIAŁEK
I JEJ WPŁYWU
NA NASZE ZDROWIE**

Nasze komórki tworzą nowe białka w każdej sekundzie naszego życia, nic więc dziwnego, że proces ten już od dawna przykuwał uwagę naukowców. Dzięki badaczom z Małopolskiego Centrum Biotechnologii Uniwersytetu Jagiellońskiego mamy szansę dowiedzieć się, w jaki sposób ten proces może być modyfikowany, aby zapobiec wielu chorobom neurodegeneracyjnym i nowotworowym.

Instrukcja tworzenia wszystkich białek, z których jesteśmy zbudowani, zapisana jest w naszym materiale genetycznym w postaci sekwencji nukleotydów – elementów budujących łańcuch DNA. Zanim jednak będzie mogła ona zostać użyta przez komórki, przepisywana jest na cząsteczkę pomocniczą (mRNA), podobnie jak my przepisujemy na kartkę ulubiony przepis z grubej książki kucharskiej, żeby podczas gotowania mieć do niego łatwy dostęp. Sam proces syntezy białek nazywamy translacją, w trakcie której komórka „odczytuje” zapisaną w mRNA kolejność aminokwasów tworzonego białka. To „odczytywanie” jest z kolei możliwe dzięki rybosomom – złożonej maszynerii molekularnej obecnej w każdej komórce w milionach egzemplarzy. Zapewniają one odpowiednie środowisko potrzebne do powstania łańcucha złożonego z połączonych ze sobą w prawidłowej kolejności aminokwasów tworzących białko. Pośredniczą w tym cząsteczki transferowego RNA (tRNA). Jak się okazuje, mogą one być modyfikowane na wiele różnych sposobów, aby jak najlepiej spełniały swoją funkcję.

Modyfikacje tRNA polegają na dołączeniu do niego w odpowiednim miejscu i odpowiedniej ilości niewielkich grup chemicznych. Średnio każda cząsteczka modyfikowana jest aż 11 razy. Te zmiany, choć subtelne, mają duży wpływ na stabilność, kształt i prawidłowe funkcjonowanie tRNA, a co za tym idzie – całej maszynerii translacyjnej. Są też ściśle zakonserwowane ewolucyjnie – znajdziemy je w organizmach ze wszystkich królestw świata żywego. Zmieniają one także tempo translacji, dzięki czemu białka są w stanie powstawać i związać się we właściwy dla siebie sposób – nie za szybko, ale też nie za wolno. Modyfikacje wprowadza duży kompleks białkowy nazywany Elongatorem, który od kilku lat jest przedmiotem zainteresowania grupy naukowców z UJ.

Aby zobrazować badane molekuly, naukowcy korzystają m.in. z innowacyjnej techniki kriomikroskopii elektronowej, do której dostęp zapewniają światowej klasy mikroskopy Cryo-EM Titan Krios i Glacios, działające w Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego SOLARIS. Kriomikroskopia elektronowa pozwala zobaczyć w trójwymiarze i szczegółowo przeanalizować strukturę biocząsteczek z dokładnością co do atomu. W 2017 roku Nagrodę Nobla w dziedzinie chemii przyznano właśnie za opracowanie potrzebnej do tego metody i algorytmów analizujących dane. Kriomikroskopia elektronowa jest na tyle zaawansowaną techniką, że wymaga zaangażowania wysokiej klasy specjalistów. Czują oni nad każdym etapem analizy – od przygotowania próbek, po przetwarzanie serii uzyskanych obrazów, z których użytkownicy otrzymują ogromne ilości danych gotowych do analizy. Efektem ich pracy jest unikatowa możliwość zajrzenia w głąb makromolekuł i przyjrzenia się ich działaniu.

Badania te mają duże znaczenie nie tylko naukowe, ale również kliniczne. Ich celem jest wyjaśnienie roli modyfikacji tRNA w normalnych i zdrowych komórkach, ale także zrozumienie ich udziału w powstawaniu chorób związanych z nieprawidłową syntezą białek. „Wiemy, że zmiany w tych mechanizmach odgrywają kluczową rolę w rozwoju raka i ciężkich chorób neurodegeneracyjnych. Naszym celem jest dostarczenie nowych narzędzi diagnostycznych i terapeutycznych do walki z obecnie nieuleczalnymi chorobami” – mówi dr Glatt, szef grupy badawczej.

i

Badania prowadzone przez naukowców mogą być realizowane dzięki wielu otrzymanym grantom finansowanym przez Narodowe Centrum Nauki, Fundację na rzecz Nauki Polskiej, Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego, Ośrodek Przetwarzania Informacji – Państwowy Instytut Badawczy, EMBO (European Molecular Biology Organization), a także Europejską Radę ds. Badań Naukowych (ERC).

Strona internetowa Structural Biology Core Facility:
<https://structuralbiology.pl/>
Strona internetowa Max Planck Research Group:
<https://glatt-lab.pl/>



|| WYKRYWANIE USZKODZEŃ DNA

Materiał genetyczny ludzkich komórek zawiera informacje, które są niezbędne do ich istnienia, funkcjonowania i rozwoju oraz do działania całego organizmu. W DNA komórek ludzkiego ciała znajduje się zapis tysięcy genów. Aby komórki mogły pełnić przypisane im w tkankach role, zapis ten musi nie tylko być kompletny, ale również zostać przekazany dalej – skopionowany bez błędów do potomnych komórek ciała i komórek rozrodczych.

DNA posiada mnóstwo niezwykle cich cech chemicznych i fizycznych, bez których nie mogłoby pełnić roli nośnika informacji, jednak podlega działaniu wielu czynników zewnętrznych, zarówno fizycznych, jak i chemicznych. Promieniowanie ultrafioletowe, promieniowanie X (Roentgena) oraz różne związki chemiczne obecne w środowisku i wnikające do komórek mogą powodować uszkodzenia DNA. Najbardziej niebezpiecznym z tych uszkodzeń jest przerwanie cząsteczki DNA. Jeśli takie uszkodzenie nie zostanie naprawione, może prowadzić do śmierci komórki albo do niekontrolowanych przez organizm zmian w jej funkcjonowaniu, w tym do transformacji nowotworowej.

Pracownicy naukowci UJ prowadzą badania nad mechanizmami indukcji i naprawy uszkodzeń DNA. Celem projektu badawczego jest opisanie budowy i roli tak zwanych ognisk naprawy DNA. Są to niewielkie struktury, które powstają wokół pęknięcia cząsteczki DNA, zbudowane z ciasno upakowanych cząsteczek białek uczestniczących w procesie naprawy tego uszkodzenia. Co więcej, badania te doprowadziły do wniosku, iż struktury powstające przy dwuniciowych pęknięciach DNA mają wyraźną wewnętrzną architekturę, a ich składniki podlegają dynamicznej wymianie z pulą niezwiązanych białek w jądrze komórki. W takich badaniach procesów naprawy materiału genetycznego często potrzebne jest

wykazanie obecności i dokładne ustalenie położenia pęknięcia DNA w jądrze komórkowym.

Wykazanie obecności pęknięcia DNA w badanym rejonie jądra komórkowego wymaga czułej i specyficznej metody wykrywania wolnych końców tej długiej cząsteczki. Dotąd znane były jedynie techniki charakteryzujące się ograniczoną czułością, które pozwalały tylko na wykrywanie setek lub tysięcy pęknięć cząsteczek DNA, zatem badacze nie mogli skutecznie wykrywać ich w swoich poszukiwaniach. Należało zatem opracować nową, doskonalszą metodę – taką, która umożliwiłaby wykrycie nawet pojedynczego pęknięcia cząsteczki DNA. Wysiłki badaczy zostały uwieńczone sukcesem, a ich nowa technika mikroskopowa, nazywana STRIDE, umożliwia przedstawienie pęknięć DNA na obrazie mikroskopowym jako punkty w jądrze komórkowym.

Technika STRIDE znajduje zastosowanie w badaniach podstawowych oraz może być z powodzeniem wykorzystywana w badaniach aplikacyjnych. Przykładami zastosowań tej metody są badania mechanizmów działania nowych leków, przyczyn niepłodności, jak i wpływu promieniowania jonizującego na DNA ludzi narażonych na jego działanie, np. w lotach na dużych wysokościach bądź podróży kosmicznych.

i

Badania prowadzone w Zakładzie Biofizyki Komórki pod kierunkiem prof. dr. hab. Jerzego Dobruckiego są finansowane przez NCN w ramach projektu badawczego OPUS14 (numer 2017/27/B/NZ3/01065) pt. „Globalna i lokalna reorganizacja chromatyny w odpowiedzi komórki na dwuniciowe pęknięcia DNA – badania metodami fluorescencyjnej mikroskopii wysokorozdzielczej (dSTORM/SMLM) oraz rezonansowego transferu energii fluorescencji (FLIM/FRET)”. Opracowana przez naukowców z UJ metoda STRIDE została objęta patentem międzynarodowym, a jej wynalazcy założyli firmę „spin-off”, w której na zlecenie laboratoriów uniwersyteckich i firm farmaceutycznych prowadzone są różnego rodzaju analizy wymagające ustalenia obecności (lub nieobecności) uszkodzeń DNA.