

SPRÁVA

o výsledkoch výskumov špecialistov Slovenskej Republiky v Inštitúte Laue-Langevine v Grenobli (Francúzsko) za r. 2017

CENI – ILL

Central European Neutron Initiative (skrátene „CENI“) je konzorciom Rakúska, Česka a Slovenska zabezpečujúcim týmto krajinám vedecké členstvo v nadnárodnej neziskovej organizácii Institut Max von Laue – Paul Langevin (skrátene „ILL“). Členstvo otvára výskumným kolektívom z týchto krajín prístup k najintenzívnejšiemu kontinuálnemu zdroju neutrónov na svete, ktorým je jadrový reaktor v Grenobli, Francúzsko. Inštitút disponuje viac ako 40-imi neutrónovými spektrometrami, doplnkovými zariadeniami a laboratóriami na prípravu a charakterizáciu vzoriek využívaných každoročne takmer 2000 užívateľmi z členských krajín ILL na vedecký výskum v odboroch fyziky, chémie a kryštalografie, biológie, biochémie, výskumu liečiv, materiálového výskumu, inžinierskych vied, ale aj vo vedách o Zemi (mineralógii, geológii), výskume palív, v štúdiu životného prostredia a archeometrii. V celkovej histórii participovania Slovenskej Republiky, ILL eviduje 37 užívateľov z rôznych vedeckých inštitúcií SR.

Finančný príspevok SR v 2017

Za členstvo v CENI a tým aj za možnosti realizovať experimenty v ILL o objeme 0,12% meracieho času prispela v roku 2017 SR do rozpočtu ILL 186 807 €.

Záujem špecialistov zo SR o prístup k inštrumentálnej báze ILL a kvalita ich navrhovaných experimentov je dokumentovaná opätovným prekročením kvóty pridelennej na základe výšky nášho príspevku.

Slovenskí špecialisti v ILL 2017

V roku 2017 boli naplánované 2 cykly reaktora, z ktorých prvý trval 48 dní od 19.1.2017 a reaktor bol v prevádzke na plný výkon (52.5 MW). Užívatelia zo slovenských inštitúcií sa počas tohto cyklu zúčastnili na meraniach súvisiacich s 3 návrhmi experimentálnych meraní (9-12-461: *Interfacial stoichiometry of polyelectrolyte/surfactant films spread from aggregates: effects of aggregate charge and ionic strength*, 9-10-1433: *Factors controlling the surfactant-mediated delivery of polyelectrolyte at a dynamic air/water interface by aggregate dissociation*, 9-12-460: *Equilibrium and non-equilibrium structures of a polyelectrolyte/surfactant mixture at the oil/water interface*). Ďalšie 2 merania prebehli za účasti Slovákov a filiovaných momentálne so zahraničnými inštitúciami (Univerzita v Edinburgu, VB; Univerzita v Bristole, VB).

V druhom cykle plánovanom na Október 2017 bol pridelený ďalší merací čas v rozsahu 7 dní (9-13-748: *Cation-induced changes in the structure of lipid membranes*). Tento cyklus bol, bohužiaľ z dôvodu inštalácie nového havarijného systému chladenia vyžadovaného autoritami nukleárnej bezpečnosti v rámci po-Fukušimovských opatrení, preložený na začiatok roka 2018 (oficiálna správa ILL v prílohe).

Forma spolupráce:

Experimentálne meranie na inštrumentálnej báze ILL:

Doc. Imre Varga	-	J. SELYE UNIVERSITY Bratislavská cesta 3322, 945 01 Komárno
Norbert Kučerka, DrSc.	-	Univerzita Komenského v Bratislave
Prof. Daniela Uhríková	-	Univerzita Komenského v Bratislave
Tomáš Kondela	-	Univerzita Komenského v Bratislave
Doc. Peter Kopčanský	-	Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice
Milan Timko, CSc.	-	Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice
Michal Rajňák, PhD.	-	Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice
Lucia Balejíková, PhD.	-	Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice

Reprezentácia SR na slávnostnej ceremónii pri príležitosti 50-teho výročia založenia ILL:

Norbert Kučerka, DrSc.	-	Univerzita Komenského v Bratislave
------------------------	---	------------------------------------

Zastúpenie SR v komisiách vedeckej rady ILL:

Doc. Peter Kopčanský	-	Ústav experimentálnej fyziky SAV, Košice
----------------------	---	--

Pozvaná prezentácia na medzinárodnej konferencii organizovanej ILL:

Norbert Kučerka, DrSc.	-	Univerzita Komenského v Bratislave
------------------------	---	------------------------------------

Dlhodobé pobyty:

Zmluva medzi CENI a ILL umožňuje získať štipendium na doktorandské/post-doktorandské štúdium priamo v ILL. V roku 2017 bol podaný jeden návrh na doktorandské štúdium záujemcu z Farmaceutickej fakulty UK v Bratislave (téma: *Interaction of model membranes with surfactants and antimicrobial peptides*). V prípade kladného hodnotenia a schválenia študijného programu nastúpi doktorand na pozíciu v Septembri 2018.

Krátkodobé pobyty:

Norbert Kučerka, DrSc.	-	18.01.2017-20.01.2017 v Grenoble, Francúzsko
Doc. Imre Varga	-	14.02.2017-17.02.2017 a 02.03.2017-08.03.2017 v ILL, Grenoble
Norbert Kučerka, DrSc.	-	04.07.2017-14.07.2017 v Daejeon, Kórejská Republika
Doc. Peter Kopčanský	-	zasadanie subkomisie vedeckej rady ILL pre magnetické štruktúry 5B (apríl 2017)

Dosiahnuté výsledky:

V roku 2017 pokračovali štruktúrne štúdie magnetickej nanokvapaliny v elektrickom a magnetickom poli. Bol študovaný možný vplyv pH na štruktúru magnetoferitínu z dôvodu potenciálneho využitia magnetoferitínu na väzbu rôznych liečiv, ktorá sa môže uskutočniť pri rôznych fyzikálno-chemických podmienkach (meranie 2016).

Štruktúra biologickej membrány bola predmetom štúdií využívajúcich malo-uhlovú difrakciu neutrónov na inštrumente D16 (meranie 2016). Pozornosť bola venovaná zabudovaniu Amyloid-beta peptidov, ktoré sú dnes spájané hlavne s konformačnými poruchami bielkovín

vedúcich k Alzheimerovej chorobe. Práve biologická membrána sa predpokladá byť prvotným miestom vzniku takýchto porúch a výsledky spomenutého výskumu odhalili možný mechanizmus interakcie medzi membránou a peptidom. Senilné plaky pozorované v mozgu pacientov sú tak s najväčšou pravdepodobnosťou len dôsledkom porúch a deštruktívne efekty vyvolávajú v membráne monoméry, alebo len malé zhluky peptidov.

V roku 2017 pokračovala aj aktívna účasť slovenských špecialistov z rôznych oblastí vedy a výskumu v nových a/alebo pokračujúcich projektoch. Za pomoci neutrónovej reflektometrie na inštrumente FIGARO sa riešili úlohy s tematikou medzifázovej stochiometrie tenkých filmov tvorených z polyelektrolytov a surfaktantov. Skúmali sa najmä vplyv a účinok náboja agregátov a ich iónovej sily. Získané výsledky majú potenciál rozšíriť vedomosti v oblasti nanomateriálov s vlastnosťami polymérov a surfaktantov, ktoré môžu pomôcť pri syntéze lepších materiálov pre budúce aplikácie.

Ciele na rok 2018:

S ohľadom na doterajšie pozitívne výsledky slovenských špecialistov v ILL sa predpokladá pokračujúci záujem o využitie inštrumentálnej bázy ILL. V roku 2018 sa očakáva uskutočnenie experimentálnych meraní schválených už v tomto roku, ale odložených z dôvodu neuskutočneného pracovného cyklu reaktoru. Na pridelenie meracieho času tak čaká návrh venujúci sa vplyvu náboja na štruktúru modelu biologickej membrány a tým aj na jej funkciu. Rovnako sa plánuje pokračovanie výskumu vplyvu náboja na štruktúru a vlastnosti syntetických nanomateriálov.

Pre budúci výskum sa budú pripraviť ďalšie experimentálne proposaly v oblasti štúdia štruktúry nanokvapalín, ktoré majú aplikačný potenciál v elektrotechnickom priemysle. Pomocou dostupného zariadenia na ILL sa bude skúmať aj štruktúra nanokvapalín počas jej prúdenia z hľadiska *in-situ* reológie a neutrónového rozptylu. Ďalším cieľom je preskúmať vplyv elektrického poľa na štruktúru natívneho feritínu a jeho syntetických derivátov ako *in vitro* modelových systémov. Elektrické pole môže viesť k transformácii anorganického jadra a oxidačnému poškodeniu rôznych biomakromolekúl v organizme. Výsledky z meraní vplyvu pH na štruktúru magnetoferitínu uskutočnené na SANS v Mníchove, v PSI Villigene a ILL Grenobli budú spracované do spoločnej publikácie.

Členský príspevok SR (prostredníctvom konzorcia CENI) do ILL na rok 2018 je kontraktuálne dohodnutý na 190 544 € a zodpovedá objemu 0,12% meracieho času. V roku 2018 sa očakáva predĺženie kontraktu konzorcia CENI, alebo SR samostatne. Pri rokovaniach s predstaviteľmi ILL bude možnosť navrhnúť navýšenie objemu meracieho času, ktorý by presnejšie zodpovedal potrebám špecialistov zo SR.

Publikačné výstupy:

A. Publikácie výsledkov v medzinárodných odborných časopisoch

1. Kondela T., Gallová J., Hauss T., Ivankov O., Kučerka N., Balgavý P.; Effect of alkan-1-ols on the structure of dopc model membrane. *European Pharmaceutical Journal* (2017) published ahead of print.
2. Norbert Kučerka, Ermuhammad Dushanov, Kholmurto T. Kholmurodov, John Katsaras, and Daniela Uhríková; Cation-Containing Lipid Membranes - Experiment and Simulations. *European Pharmaceutical Journal* (2017) published ahead of print.

3. Norbert Kučerka, Ermuhammad Dushanov, Kholmurzo T. Kholmurodov, John Katsaras, and Daniela Uhríková; Lipid membranes loaded with Ca²⁺ and Zn²⁺ cations. *Journal of Physics: Conference Series* 848 (2017) 012008.
4. Norbert Kučerka, Ermuhammad Dushanov, Kholmurzo T. Kholmurodov, John Katsaras, and Daniela Uhríková; Calcium and zinc differentially affect the structure of lipid membranes. *Langmuir* 33 (2017) 3134-3141.
5. M. Rajnak, M. Timko, P. Kopcansky, K. Paulovicova, J. Tothova, J. Kurimsky, B. Dolnik, R. Cimbala, M.V. Avdeev, V.I. Petrenko, A. Feoktystov, Structure and viscosity of a transformer oil-based ferrofluid under an external electric field, *J. Magn. Magn. Mater.* 431 (2017) 99–102.
6. L. Balejčíková, V. M. Garamus, M. V. Avdeev, V. I. Petrenko, L. Almásy, P. Kopčanský. The effect of solution pH on the structural stability of magnetoferritin. In *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, 2017, vol. 156, p. 375-381.
7. L. Balejčíková, V. I. Petrenko, M. V. Avdeev, V. M. Garamus, L. Almásy, P. Kopčanský. Small-Angle Scattering on Magnetoferritin Nanoparticles. In *Journal of Physics: Conference Series*, 2017, vol. 848, p. 012011.

B. Práce vydané vo forme preprintov a v nekarentovaných časopisoch

1. Norbert Kučerka, Štruktúra lipidových membrán a ich interakcie s liečivami zviditeľnené pomocou rozptylu neutrónov a röntgenového žiarenia. *Československý časopis pro Fyziku* 3 (2017) 139-148.
2. T. Kondela, B. Demé, N. Kučerka, The interaction between amyloid-β peptides and model membrane containing cholesterol and/or melatonin. ILL experimental report.

C. Práce prezentované na rôznych medzinárodných konferenciách

1. Norbert Kučerka, Perspektívy modelových biologických membrán študovaných rozptylom neutrónov a Rtg žiarenia. 19. konferencia českých a slovenských fyzikov, Presov, Slovakia, September 4-7, 2017, abstract.
2. Norbert Kučerka, Ermuhammad Dushanov, Kholmurzo T. Kholmurodov, John Katsaras, Daniela Uhríková, Peculiar properties of lipid membranes by neutron diffraction. International Conference on Neutron Scattering, Daejeon, Republic of Korea, July 9-13, 2017, abstract.
3. Kučerka Norbert, Demé Bruno, Kondela Tomáš, The interaction between amyloid-beta peptides and model membrane containing cholesterol and melatonin. Neutron diffraction and the nanoscale, Daejeon, Republic of Korea, July 6-7, 2017, abstract.
4. Uhríková D., Kholmurodov K., Kondela T., Demé B., Kučerka N., Peculiar properties of lipid membranes by neutron diffraction. Book of Abstracts, Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, Dubna, Russian Federation, June 28-30, 2017, p.: 43 abstract.
5. Kondela T., Demé B., Kučerka N., The interaction between amyloid-β peptides and model membrane containing cholesterol and/or melatonin. Book of Abstracts, Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, Dubna, Russian Federation, June 28-30, 2017, p.: 40 abstract.
6. Hrubovčák, P., Kondela T., Demé B., Kučerka N., Location of the general anesthetics in

model membranes. Book of Abstracts, Complex and Magnetic Soft Matter Systems: Physico-Mechanical Properties and Structure, Dubna, Russian Federation, June 28-30, 2017, p.: 37 abstract.

D. Práce prijaté resp. zaslané do medzinárodných odborných časopisov

1. Tomáš Kondela, Jana Gallová, Thomas Hauss, Jonathan Barnoud, Siewert-Jan Marrink, Norbert Kučerka; Alcohol interactions with lipid bilayers. Zaslané do Molecules - Special Issue "Phospholipids: Structure and Function".

E. Učebnice a monografie

F. Organizácia konferencií a editovanie zborníkov

G. Obhájené vedecké práce

1. Kučerka N.: Biophysical Perspectives of Model Biological Membranes Studied by Neutron and X-ray Scattering. Doctoral Dissertation. Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach, 2017.

Správu vypracoval:

Mgr. Norbert Kučerka, DrSc.
Akademický garant SR v konzorciu CENI
KFChL FaFUK v Bratislave