



POLISH NATIONAL AGENCY
FOR ACADEMIC EXCHANGE



STER
PROGRAMME

<p>nazwa jednostki:</p> <p>LABORATORIUM BADANIA EFEKTÓW IZOTOPOWYCH</p> <p>http://lies.p.lodz.pl</p> <p>Międzyresortowy Instytut Techniki Radiacyjnej Politechniki Łódzkiej</p>		<p>symbol:</p> <p>I-34</p> <p>http://mitr.p.lodz.pl</p>
<p>kierownik:</p> <p>Agnieszka Dybała-Defratyka</p>	<p>potencjalni promotorzy:</p> <p>Agnieszka Dybała-Defratyka Piotr Paneth Michał Rostkowski (jako promotor pomocniczy) Agata Sowińska (jako promotor pomocniczy)</p>	<p>osoba do kontaktu:</p> <p>Agnieszka Dybała-Defratyka 31-98 agnieszka.dybala-defratyka@p.lodz.pl</p>
<p>zakres działalności:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Obliczenia mechanizmów reakcji chemicznych i katalizowanych enzymatycznie2. Badania efektów izotopowych reakcji i procesów chemicznych3. Analiza izotopowa węgla, azotu i siarki próbek organicznych4. Oddziaływania białko-białko i białko-ligand		<p>materiał graficzny</p> 
<p>działalność obecna:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Izotopowe uwierzytelnianie produktów2. Skład izotopowy jako marker w diagnostyce nowotworów3. Połączone badania eksperymentalno-teoretyczne substancji farmakologicznie czynnych4. Obliczenia efektów izotopowych5. Oddziaływania białko-ligand w wybranych dehalogenazach6. Degradacja enzymatyczna wybranych halogenopochodnych związków organicznych7. Dynamika konformacyjna wybranych enzymów8. Komputerowe (re)ProjectWise wybranych dehalogenaz		
<p>przyszłe działania:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Kontynuacja badań składu izotopowego jako markera w diagnostyce nowotworów2. Badania efektów izotopowych asocjacji leków w nanostrukturach3. Komputerowe projektowania mutacji białek4. Ewolucja enzymów biorących udział w metabolizmie trwałych zanieczyszczeń organicznych5. Badania białek membranowych i ich oddziaływań z drobnocząsteczkowymi ligandami o potencjale farmakologicznym		



POLISH NATIONAL AGENCY
FOR ACADEMIC EXCHANGE



STER
PROGRAMME

6. Rozwój narzędzi obliczeniowych do obliczeń efektów izotopowych

publikacje/patenty/nagrody/granty:

Wybrane publikacje (ostatnie 3 lata):

1. M. Rostkowski, H. Schurner, A. Sowińska, L. Vasquez, M. Przydacz, M. Elsner, A. Dybala-Defratyka, **Isotope Effects on the Vaporization of Organic Compounds from an Aqueous Solution – Insight from Experiment and Computations**, J. Phys. Chem. B, 125 (2021) 13868, DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c05574
2. M. Julien, M. Liegeois, P. Hohener, P. Paneth and G. Remaud, **Intramolecular non-covalent isotope effects at natural abundance associated with the migration of paracetamol in solid matrices during liquid chromatography**, J. Chromat. A 1639 (2021) 461932, DOI: 10.1016/j.chroma.2021.461932
3. A. Paneth, P. Paneth, **Isotopic Consequences of Host-Guest Interactions; Noncovalent Chlorine Isotope Effects**, J. Phys. Chem. B 125 (2021) 1874, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c10691
4. L. Chai, H. Zhang, R. Song, H. Yang, H. Yu, P. Paneth, K.P. Kepp, M. Akamatsu, and L. Ji, **Precision Biotransformation of Emerging Pollutants by Human Cytochrome P450 Using Computational–Experimental Synergy: A Case Study of Tris(1,3-dichloro-2-propyl) Phosphate**, Environ. Sci. Technol. 55 (2021) 14037, DOI: 10.1021/acs.est.1c03036
5. “RNA-inspired intramolecular transesterification accelerates the hydrolysis of polyethylene-like polyphosphoesters” Tobias P. Haider, Oksana Suraeva, Ingo Lieberwirth, Piotr Paneth, Frederik R. Wurm Chem. Sci. 12, 16054-16064 (2021)
6. K. Bogusiak, A. Puch, R. Mostowski, M. Kozakiewicz, P. Paneth, and J. Kobos, **Characteristic of Oral Squamous Cell Carcinoma Tissues Using Isotope Ratio Mass Spectrometry**, J. Clin. Med. 9 (2020) 3760, DOI: 10.3390/jcm9113760
7. A. Sowińska, L. Vasquez, S. Żaczek, R. N. Manna, I. Tuñón, and A. Dybala-Defratyka, **Seeking the Source of Catalytic Efficiency of Lindane Dehydrochlorinase, LinA**, J. Phys. Chem. B 124 (2020) 10353, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c08976
8. K. Klajman, A. Dybala-Defratyka, P. Paneth, **Computational investigations of position-specific vapor pressure isotope effects in ethanol toward more powerful isotope models for food forensics**, ACS Omega 5 (2020) 18499, DOI: 10.1021/acsomega.0c02446
9. F. Gelman, A. Dybala-Defratyka, **Bromine Isotope Effects: Predictions and Measurements**, Chemosphere, 246 (2020) 125746, DOI: 10.1016/j.chemosphere.2019.125746
10. S. Kannath, P. Adamczyk, D. Ferro-Costas, D.T. Major, A. Fernandez-Ramos, A. Dybala-Defratyka, **Role of Microsolvation and Quantum Effects in the Accurate Prediction of Kinetic Isotope Effects: The Case of Hydrogen Atom Abstraction in Ethanol by Atomic Hydrogen in Aqueous Solution**, J. Chem. Theory Comput. 16 (2020) 847, DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00774
11. S. Kannath, P. Adamczyk, L. Wu, H.H. Richnow, A. Dybala-Defratyka, **Can Alkaline Hydrolysis of γ -HCH Serve as a Model Reaction to Study Its Aerobic Enzymatic Dehydrochlorination by LinA?**, Int. J. Mol. Sci. 20 (2019) 5955, DOI: 10.3390/ijms20235955
12. G. Ciepielowski, B. Pacholczyk-Sienicka, T. Frączek, K. Klajman, P. Paneth, Ł. Albrecht, **Comparison of quantitative NMR and IRMS spectrometry for the authentication of “Polish Vodka”**, J. Sci. Food Agricult. 99 (2019) 263-268, DOI: 10.1002/jsfa.9168
13. M. Pokora, P. Paneth, **Can Adsorption on Graphene be Used for Isotopic Enrichment? A DFT Perspective**, Molecules 23 (2018) 2981, DOI: 10.3390/molecules23112981
14. S. Żaczek, J. Kowalska, A. Dybala-Defratyka, **Ligand-Driven Conformational Dynamics Influences Selectivity of UbiX**, ChemBioChem, 2018, DOI: 10.1002/cbic.201800389
15. L. Vasquez, M. Rostkowski, F. Gelman, A. Dybala-Defratyka, **Can PIMD Make a Good Approximation for Vapor Pressure Isotope Effects Prediction for Organic Solvents? A Comparison to ONIOM QM/MM and QM Cluster Calculation**, J. Phys. Chem. B, 122 (2018) 7353, DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b03444
16. A. Drzazga, A. Sowinska, A. Krzeminska, A. Okruszek, P. Paneth, M. Koziółkiewicz, E. Gendaszewska-Darmach, **2-OMe-lysophosphatidylcholine analogues are GPR119 ligands and activate insulin secretion**



POLISH NATIONAL AGENCY
FOR ACADEMIC EXCHANGE



STER
PROGRAMME

from β TC-3 pancreatic cells: Evaluation of structure-dependent biological activity, *Biochim. Biophys. Acta* 1863 (2018) 91-103, DOI: [10.1016/j.bbaliip.2017.10.004](https://doi.org/10.1016/j.bbaliip.2017.10.004),

17. R.N. Manna, A. Grzybkowska, F. Gelman, A. Dybala-Defratyka, **Carbon-bromine bond cleavage – A perspective from bromine and carbon kinetic isotope effects on model debromination reactions**, *Chemosphere* 193 (2018) 17-23, DOI: [10.1016/j.chemosphere.2017.10.153](https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2017.10.153)

Granty (ostatnie 3 lata):

1. International Center for Research on Biobased Materials - the International Research Agendas PLUS programme of the Foundation for Polish Science, co-financed by The European Union under the European Regional Development Found
2. SONATA-BIS (UMO-2-14/14/E/ST4/00041) by NCN, Poland, *Nowe perspektywy w przewidywaniu efektów izotopowych w fazie skondensowanej*
3. Diamentowy Grant Program (0145/DIA/2017/46) by Ministry of Education and Science, Poland, *Badania enzymatycznej biosyntezy styrenu i jego pochodnych*

słowa kluczowe:

chemia obliczeniowa, efekty izotopowe, analiza izotopowa, biochemia obliczeniowa, enzymy, dehalogenacja

lista propozycji staży w danej grupie badawczej:

- Analiza strukturalna i charakterystyka oddziaływań międzycząsteczkowych w układach białko-ligand przy użyciu narzędzi chemii obliczeniowej
- Badania porównawcze różnych narzędzi bioinformatycznych służących do projektowania mutacji białek
- Badania kinetyczne wybranych reakcji enzymatycznych
- Badania konformacyjne wybranych białek błonowych
- Narzędzia do analizy porównawczej i testowania do obliczeń efektu izotopowego
- Narzędzia testowe do wizualizacji i interpretacji oddziaływań międzycząsteczkowych