

Badania Strukturalne w XXI wieku – Wykorzystanie Dyfrakcji Elektronów, Neutronów oraz Promieniowania Rentgenowskiego

Maura Malińska

Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawskiego
mmalinska@chem.uw.edu.pl

25.04.2024, 10.00, sala 2.61

Streszczenie: W dzisiejszym dynamicznie rozwijającym się świecie badania strukturalne odgrywają kluczową rolę w poznawaniu i zrozumieniu różnorodnych materiałów i substancji. Istotność tych badań wynika z ich zdolności do dostarczania fundamentalnych informacji na temat struktury atomowej oraz organizacji molekularnej substancji, co z kolei umożliwia projektowanie nowych leków, materiałów o wyjątkowych właściwościach, czy też opracowywanie zaawansowanych technologii. Badania strukturalne obejmują różnorodne techniki, takie jak dyfrakcja elektronów, neutronowa oraz promieniowania rentgenowskiego, które pozwalają na dokładne analizowanie struktur na poziomie gęstości atomowej. Rozwój badań strukturalnych uwidacznia się również w poprawie jakości danych eksperymentalnych dzięki ulepszeniu technik pomiarowych oraz sprzętu, takiego jak detektory i źródła promieniowania, oraz wykorzystanie zaawansowanych modeli gęstości atomowej do dokładniejszego określenia struktur krystalicznych. Wykład skupia się na odpowiedzi na pytanie: "Pokaż mi kryształ, a powiem ci, jak uzyskać z nich strukturę".

Życiorys: Maura Malińska jest kierownikiem grupy badawczej w Zakładzie Chemii Teoretycznej i Strukturalnej na Uniwersytecie Warszawskim. W 2014 roku obroniła pracę doktorską pt. "Struktura i gęstość elektronowa substancji farmaceutycznych w stanie stałym" pod kierunkiem prof. dr hab. Krzysztofa Woźniaka i prof. dr hab. Andrzeja Kutnera. Odbiła staże podoktorskie m.in. w Center for Cancer Research, National Cancer Institute w grupie Zbigniewa Dautera oraz w Caltechu w grupie Willam Goddarda. Jest współautorką 65 prac, publikowanych m.in. w czasopismach Acta Crystallographica, Crystal Growth & Design, JACS, Journal of Pharmaceutical Sciences, Organometallics i ChemComm. Jej prace zostały cytowane ponad 1400 razy. Maura Malińska prezentowała wyniki badań na 40 konferencjach, z czego 20 wystąpień było ustnych. Maura Malińska pełniła funkcję promotora pomocniczego w procesie obrony pracy doktorskiej oraz prowadziła 6 prac magisterskich i 6 prac licencjackich. Maura Malińska jest członkiem Polskiego Towarzystwa Krystalograficznego oraz European Crystallographic Association gdzie działa jako Sekretarz SIG2 Krystalografii Kwantowej. Aktywnie uczestniczy w promocji nauk chemicznych i krystalografii, współpracując m.in. z Funduszem na rzecz Dzieci i Narodowym Centrum Kopernika w Warszawie. Była kierownikiem grantów przyznanych przez Narodowe Centrum Nauki oraz MNiSW. Obecnie jej badania koncentrują się na rozpoznawaniu cząsteczkowym w środowisku wodnym oraz na zrozumieniu zmian entalpii i entropii dla związków o podobnej strukturze molekularnej.