



Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-19-0487

Bionanocompozitné materiály na báze vrstevnatých silikátov

Zodpovedný riešiteľ **RNDr. Jana Madejová, DrSc.**

Príjemca **Ústav anorganickej chémie SAV, v. v. i.**

Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Ústav anorganickej chémie SAV, v.v.i.

Ústav polymérov SAV, v.v.i.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

Ústav makromolekulárnej chémie AV ČR, v.v.i., Praha, Česká republika

Keppler University, Linz, Rakúsko

University of Natural Resources and Life Sciences, Vienna A-1190, Rakúsko

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

Počet podaných/udelených patentov: 0

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. BARLOG, Martin** – PÁLKOVÁ, Helena – BUJDÁK, Juraj. Luminescence of a laser dye in organically-modified layered silicate pigments. In Dyes and Pigments, 2021, vol. 191, p. 109380-1-109380-11. (2020: 4.889 – IF, Q1 – JCR, 0.827 – SJR, Q1 – SJR, – CCC). (2021 – Current Contents). ISSN 0143-7208. <https://doi.org/10.1016/j.dyepig.2021.109380>.

SKOURA, Eva - BOHÁČ, Peter - BARLOG, Martin - PÁLKOVÁ, Helena - DANKO, Martin - ŠURKA, Juraj - MAUTNER, Andreas - BUJDÁK, Juraj**. Modified polymer surfaces: Thin films of silicate composites via polycaprolactone melt fusion. In International Journal of Molecular Sciences, 2022, vol. 23, p. 9166-1-9166-16. (2021: 6.208 - IF, Q1 - JCR, 1.176 - SJR, Q1 - SJR, karentované - CCC). ISSN 1422-0067.

<https://doi.org/10.3390/ijms23169166>

2. MADEJOVÁ, Jana** - BARLOG, Martin - SLANÝ, Michal - BASHIR, Sanam - SCHOLTZOVÁ, Eva - TUNEGA, Daniel - JANKOVIČ, Ľuboš. Advanced materials based on montmorillonite modified with poly(ethylenimine) and poly(2-methyl-2-oxazoline):

Experimental and DFT study. In Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2023, vol. 659, art. no. 130784. (2022: 5.2 - IF, Q2 - JCR, 0.792 - SJR, Q1 - SJR). ISSN 0927-7757. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2022.130784>

3. BASHIR, Sanam** - SCHOLTZOVÁ, Eva - TUNEGA, Daniel. Mechanical properties of pristine smectite clay minerals and clay-polymer hybrids studied by the DFT method. Publikácia bola prijatá do časopisu Clays and Clay Minerals

PRIBUS, Marek** - JANKOVIČ, Ľuboš – KUREKOVÁ BIZOVSKÁ Valéria - BARLOG, Martin, MADEJOVÁ, Jana. Intercalation Characteristics of Montmorillonite Modified with

Poly(2-n-alkyl-2-oxazoline)s. Revidovaná verzia rukopisu bude odoslaná do časopisu *Macromolecules*.

4. KRONEKOVÁ, Zuzana - JANKOVIČ, Luboš - MOŠKOVÁ, Zuzana - MINARČÍKOVÁ, Alžbeta ZHUKOUSKAYA, Hanna - KUČKA, Jan - VETRÍK, Miroslav - HRUBÝ, Martin - KRONEK, Juraj **. Partially hydrolyzed poly(2-oxazoline)s as new class of biocompatible modifiers of montmorillonites for adsorption and decontamination of organic molecules. Odoslané do *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*.

Revidovaná verzia bude odoslaná do redakcie.

5. KRONEKOVÁ, Zuzana – MAJERČÍKOVÁ, Monika – PAULOVIČOVÁ, Ema – DANKO, Monika - MARKUS, Jan - LETASIOVA, Silvia – KRONEK, Juraj **. Cytotoxicity and bioimmunological activity of poly(2-isopropenyl-2-oxazoline) conjugates with ibuprofen using 3D reconstructed tissue models. In *Biomacromolecules*, 2024, vol. 25, no. 6, p. 3288-3301. (2023: 5.5 - IF, Q1 - JCR, 1.232 - SJR, Q1 - SJR). ISSN 1525-7797.

<https://doi.org/10.1021/acs.biomac.3c01434>.

6. KRONEK, Juraj ** - MINARČÍKOVÁ, Alžbeta - MAJERČÍKOVÁ, Monika – KRONEKOVÁ, Zuzana – STRASSER, Paul – TEASDALE, Ian. Poly(2-isopropenyl-2-oxazoline) as a versatile functional polymer for biomedical applications. In *Polymers : Open Access Polymer Science Journal*, 2024, vol. 16, art.no. 1708. (2023: 4.7 - IF, Q1 - JCR, 0.8 - SJR, Q1 - SJR).

7. PAULOVIČOVÁ, Ema - KRONEKOVÁ, Zuzana - PAULOVIČOVÁ, Lucia - MAJERČÍKOVÁ, Monika - KRONEK, Juraj **. Cell-mediated immunoreactivity of poly(2-isopropenyl-2-oxazoline) as promising formulation for immunomodulation. In *Materials*, 2021, vol. 14, art. no. 1371, [18] p. (2020: 3.623 - IF, Q1 - JCR, 0.682 - SJR, Q2 - SJR, karentované - CCC). (2021 - Current Contents). ISSN 1996-1944.

<https://doi.org/10.3390/ma14061371>

8. SAPAROVÁ, Simona - ONDRIŠ, Leoš ** - KOVALÁKOVÁ, Mária - FRIČOVÁ, Oľga - PEIDAYESH, Hamed - BARAN, Anton - HUTNÍKOVÁ, Mária - CHODÁK, Ivan. Effects of glycerol content on structure and molecular motion in thermoplastic starch-based nanocomposites during long storage. In *International Journal of Biological Macromolecules*, 2023, vol. 253, art.no. 126911, [10] p. ISSN 0141-8130.

Uplatnenie výsledkov projektu

Výsledky projektu prispievajú k lepšiemu pochopeniu vlastností nových typov bionanokompozitov pripravených z vrstevnatých silikátov zo skupiny smektitov a komerčných a novo-syntetizovaných polymérov, predovšetkým na báze poly(2-oxazolínov) (POx). V priebehu riešenia projektu sa pripravili nové typy poly(2-oxazolínov) s dobrou kontrolou štruktúry, náboja a nízkej in vitro cytotoxicity. Nové metódy syntézy poly(2-oxazolínov), adsorpcia POx do medzivrstvových priestorov smektitov a na vonkajší povrch minerálu a detailná charakterizácia materiálov otvára viaceré možnosti ich využitia:

Výsledky projektu majú potenciál uplatniť sa v rôznych rovinách, napríklad:

a) Nové hybridné materiály pre biomedicínske aplikácie a ochranu životného prostredia.

Kombinácia netoxických a funkcionalizovateľných poly(2-oxazolínov) a montmorillonitov viedla k úspešnej adsorpcii POx do medzivrstvových priestorov. Získané organomodifikované ílové materiály predstavujú netoxické materiály a v porovnaní s nemodifikovanými montmorillonitmi dosahovali zlepšenie adsorpcie a dekontaminácie nebezpečných organických molekúl, ako sú pesticídy a bojové chemické látky a majú potenciál uplatnenia pri ochrane zdravia a životného prostredia.

b) Prenos poznatkov do aplikačnej praxe, čo je zabezpečené nielen publikovaním výsledkov v odborných vedeckých časopisoch, ale aj možnou spolupracou s priemyselným partnerom. Napríklad, prídavok nanokompozitov na báze POx-Mnt do matrice prírodného kaučuku ukázali, že tieto nanoplňivá by mohli byť perspektívne z hľadiska dynamicko-mechanických vlastností a v praxi by sa mohli aplikovať ako jeden z komponentov behúňových zmesí pre pneumatiky.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Hlavným cieľom projektu bola príprava a komplexná charakterizácia nových typov hybridných materiálov pozostávajúcich z minerálov zo skupiny smektitov, najmä montmorillonit (Mnt), a komerčných a novo-syntetizovaných polymérov na báze poly(2-oxazolínov) (POx). Rozsiahly prieskum interkalačných charakteristík rôznych typov

kompozitov POx-Mnt priniesol vopred neočakované zistenia v podobe odhalenia masívnej adsorpcie doposiaľ neštudovanej skupiny polymérov do medzivrstvového priestoru smektitov a na ich vonkajší povrch. DFT výpočty potvrdili vysokú stabilitu študovaných hybridných systémov, pričom vyššia stabilita štruktúr s trioktaédrickými smektitmi sa prejavila aj v ich lepších mechanických vlastnostiach. Nové spôsoby polymerizácie oxazolínov otvorili široké možnosti prípravy dobre definovaných polykatiónov s presne navrhnutou molekulovou štruktúrou a zaujímavými biokompatibilnými vlastnosťami, ktoré sú potrebné pre modifikáciu smektitov interkaláciou. Poly(2-oxazolíny) predstavujú polyméry vhodné pre využitie v in vivo a in vitro podmienkach vďaka ich netoxickému charakteru. Preto je ich možné využiť pri ochrane životného prostredia, ako sa ukázalo v pilotnej štúdii pri dekontaminácii paraoxonu. Zaujímavé výsledky sa pozorovali v oblasti dynamických vlastností pripravených POx nanokompozitov s elastomérnou maticou prírodného kaučuku, čo naznačuje možnosť ich využitia v automobilovom priemysle. Výsledky projektu viedli k publikovaniu 31 vedeckých prác v impaktovaných zahraničných časopisoch, ktoré boli citované viac ako 55 krát, ako aj množstva príspevkov na domácich a zahraničných konferenciách. Dosiahnuté výsledky sú vo všetkých oblastiach v plnom súlade so stanovenými cieľmi projektu.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

The main aim of the project was the preparation and complex characterization of novel, sophisticatedly designed hybrid materials consisting of minerals from smectite group, mainly montmorillonite (Mnt), and commercially available and newly-synthesized polymers based on poly(2-oxazolines) (POx). Extensive research of the intercalation characteristics of different types of POx-Mnt composites provided unexpected findings related to the detection of huge adsorption of studied polymers into the interlayer space and on outer surface of smectites. DFT calculations confirmed high stability of the studied hybrid systems; higher stability of trioctahedral smectites resulted also in their better mechanical properties. New methods of the 2-oxazolines polymerization opened wide possibilities of the preparation of well-defined polycations with strictly proposed molecular structure and interesting biocompatible properties required for the modification of smectites by intercalation. Poly(2-oxazolines) represent polymers which, due to their non-toxic character, are suitable for in vivo and in vitro experiments. Such systems can be also used for the environment protection as showed the pilot study of the decontamination of toxic paraoxon. The interesting results, obtained in the field of the dynamic properties of prepared POx nanocomposites with elastomeric matrix of natural rubber, indicated their application possibilities in the car industry. The results of the project led to the 31 publications in foreign impacted journals, which were cited more than 55 times, as well as to the numerous contributions presented at various domestic and mainly foreign conferences. The achieved results are in full accordance with the set goals of the project.