

Jednym z ważniejszych zadań współczesnego społeczeństwa jest rozwiązanie problemu chorób nowotworowych. Pomimo powszechnego stosowania chemioterapii, pojawiają się coraz częstsze doniesienia o jej braku skuteczności. Wkład niniejszego projektu przyczyni się do rozwoju alternatywnych do chemioterapii metod leczenia nowotworów i nanomedycyny, z udziałem materiałów o strukturze dwuwymiarowej (2D). W tym obszarze interesujące są fazy MXenes, z uwagi na ich unikatowe właściwości fizyko-chemiczne i strukturę. Przełom może stanowić redukcja ich wymiaru poprzecznego i otrzymanie nano-kryształów 2D.

Właściwości materiałów 2D różnią się znacząco od ich odpowiedników 3D. Jednym z lepszych przykładów jest grafen i jego trójwymiarowy odpowiednik grafit. Grafen jako struktura 2D jest bardzo dobrym przewodnikiem ciepła i prądu, transparentny, charakteryzujący się bardzo wysoką ruchliwością elektronów. Właściwości te znacząco odróżniają go od jego odpowiednika 3D – grafitu, miękkiego nieprzezroczystego minerału, łupliwego i podatnego na ścieranie. Ta różnica we właściwościach struktur 2D i 3D sprawia, że wciąż poszukuje się sposobów na przekształcenie znanych warstwowych struktur trójwymiarowych w unikalne pod względem właściwości struktury dwuwymiarowe. Do takich znanych od wielu lat struktur 3D należą związki  $M_{n+1}AX_n$  z naprzemiennie ułożonymi warstwami metalu i niemetalu zwane fazami MAX. Nasze wstępne badania potwierdzone danymi literaturowymi, wykazały możliwość ekspandowania faz MAX do MXenów poprzez usunięcie jednej warstwy pierwiastka ze struktury krystalicznej. Ponadto, używając sonikacji w cieczy potrafimy rozwarstwiać MXeny do struktur 2D karbidków lekkich metali przejściowych.

Głównym celem naukowym i poznawczym projektu jest zbadanie właściwości przeciwnowotworowych i cytotoksycznych *in vitro* nowej rodziny nano-kryształów 2D karbidków i azotków tytanu (faz MXenes, takich jak  $Ti_2C$ ,  $Ti_3C_2$ ,  $Ti_2N$ ,  $Ti_4N_3$ ) oraz ich wpływu na komórki w aspekcie: (A) *specyficznych interakcji natury fizyko-chemicznej pomiędzy nano-kryształem 2D a powierzchnią komórki i/lub jej wnętrzem*, (B) *funkcjonowania komórki - mechanizmów molekularnych interakcji na poziomie receptorów, białek i genów*. Celem jest także stworzenie nowego zespołu badawczego i jego rozwój w wyniku realizacji projektu, w oparciu o połączenie badań eksperymentalnych i symulacji komputerowych.

W ramach projektu zostaną zbadane dwuwymiarowe nano-kryształy karbidków i azotków tytanu o różnej stechiometrii ( $Ti_2C$ ,  $Ti_3C_2$ ,  $Ti_2N$  czy  $Ti_4N_3$ ). Zostały one wybrane spośród bardzo licznej grupy faz MXenes jako obiecujące w kontekście poszukiwania potencjalnych leków przeciwnowotworowych. Zaplanowane badania podstawowe interakcji nano-kryształów 2D faz MXenes w stosunku do komórek nowotworowych oraz prawidłowych *in vitro* umożliwią uzyskanie niezbędnych informacji o wpływie ich właściwości na obserwowane mechanizmy. Metody numeryczne będą stanowić natomiast cenne uzupełnienie badań eksperymentalnych, redukując ilość testów tj. czas i koszty badań oraz zapewnią wsparcie dla ostatecznej weryfikacji postawionej hipotezy badawczej.